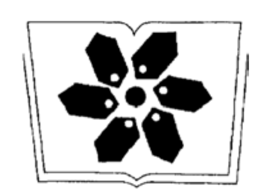
现代物理基础丛书



反常统计动力学导论

包景东　著





中国科学院科学出版基金资助出版

《现代物理基础丛书》编委会

主　编　杨国桢

副主编　阎守胜　聂玉昕

编　委（按姓氏笔画排序）

王　牧　王鼎盛　朱邦芬　刘寄星

邹振隆　宋菲君　张元仲　张守著

张海澜　张焕乔　张维岩　侯建国

侯晓远　夏建白　黄　涛　解思深

现代物理基础丛书　44

反常统计动力学导论

包景东　著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书系统深入地介绍了反常扩散和输运过程的机制、模型及数值模拟方法，全书共 12 章. 其内容包括随机变量和概率分布、演化方程、反常扩散现象、非各态历经随机运动、含非欧姆摩擦的广义朗之万方程、连续时间无规行走、分数阶微积分、分数阶朗之万方程、分数阶福克尔-普朗克方程、莱维飞行、非广延统计力学和数值算法. 用非传统的模型与方法处理反常现象，例如，引入了分数阶微积分、连续时间无规行走等几个新技术，同时又能过渡到正常扩散；也关注一些新近实验感兴趣的课题，例如，小系统热力学、老化问题、反常热传导等.

本书力求理论上来龙去脉清楚，基础与前沿兼顾，包含了作者的研究成果. 以助从事随机动力学的科技人员扩大视野、创建模型，也可供高等学校物理、化学、核科学、生物、系统科学、应用数学等专业的本科生和研究生学习热力学与统计物理、非平衡态统计物理、随机过程、数学选讲参考之用.

图书在版编目(CIP)数据

反常统计动力学导论/包景东著. —北京：科学出版社, 2012

(现代物理基础丛书；44)

ISBN 978-7-03-034868-5

Ⅰ. ①反… Ⅱ. ①包.… Ⅲ. ①数理统计-应用-动力学-研究 Ⅳ. O313

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 129088 号

责任编辑：刘凤娟 尹彦芳／责任校对：陈玉凤
责任印制：钱玉芬／封面设计：陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

中国科学院印刷厂印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2012 年 6 月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2012 年 6 月第一次印刷 印张：23
字数：440 000

定价：79.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　言

近年来，随着实验手段的极大进步，人们愈加关心尺度越来越小、条件越来越极端的系统. 因而，许多领域呈现了偏离布朗运动特征和非标准统计物理的结果. 最简单的情况为自由粒子的一维随机运动，其位移平方的平均值在长时间下不再是随时间线性增长的函数，而是一个时间的幂函数：$\langle(\Delta x)^2\rangle \propto 2Dt^\alpha$，这里 α 为一个介于 0 和 2 之间的任意实数. 其中，$0 < \alpha < 1$ 为欠扩散；$\alpha = 1$ 是正常扩散；$1 < \alpha < 2$ 为超扩散. 两个极限：$\alpha = 0$ 对应于局域化，$\alpha = 2$ 称为弹道扩散，皆可通过非马尔可夫朗之万方程实现. 当然，$\alpha > 2$ 的情况也在湍流中被发现.

“反常的是正常的”—— 探索奇异现象和发展新理论业已成为科学共同体的兴趣和动力所在. 有关反常扩散的文章数量以快于线性随时间增长的速度问世，例如，2008 年就有大约 500 篇这方面的论文发表.

产生反常扩散的机制在于：①复杂几何诱发；②跳跃长度或等待时间的长拖尾分布；③非马尔可夫长程关联记忆. 第一种是事先未知的、由过程来确定；在后两种情况下，关于随机变量的分布密度函数或者动力学方程是已知的. 反常扩散模型有三类：连续时间无规行走、分数阶布朗运动、广义朗之万方程. 与正常扩散相比较，反常扩散的结果导致非指数弛豫和非玻尔兹曼分布，比如欠扩散具有慢衰减特性，但其稳定态接近热平衡系统；而莱维飞行给出了放大和弥散的扩散，破坏了统计物理赖以生存的中心极限定理. 自由状态下呈反常扩散的系统置于简谐势、非谐势、双阱势、周期势、亚稳势等各种势场以及摩擦环境之下，它们可以用来模型许多具体问题. 这里耗散性的过程也通称为输运过程. 其中的弛豫、输运、稳定态及热力学行为是非常值得研究的.

对反常扩散和输运机制的研究衍生出来了“分数阶统计动力学”，例如，分数阶福克尔–普朗克方程和分数阶朗之万方程. 核心是引入了分数阶时间和空间导数，即黎曼–刘维尔分数阶微积分. 前者用在欠扩散中，后者导致超扩散. 这与人们以往熟知的分数物理和分形物理有着本质上的差别. 例如，定义粒子的分数阶速度为它位置的分数阶导数，这时已经没有瞬间速度的概念，而是把轨道的历史贡献进来，那么牛顿力学和朗之万随机力学需要推广. 统计力学与物理学的任何其他分支学科相比，更容易受到方法论和表述问题的困扰. 对物理工作者而言，概率和统计方法一直使他们非常苦恼. 这种方法并不是为得到结果的权宜之计，它深刻的物理含

意和巨大功效是十分迷人的.

本书将扩散的量子理论搁置一边，而仅关注经典非平衡和非标准统计力学，原因有三点. ①显然，这种做法为处理大量有趣但并不生僻的问题 (它们均是目前研究的前沿) 留出了空间. 包括诸如破缺系统、分形环境、老化问题、非各态历经、反常热传导等. 这些问题并不出现在一般的统计力学书中；另外，由于破缺系统不严格存在可分离的时间尺度，不能用简单的布朗运动模型和朗之万方程来刻画，那些复杂的情形不能用规则的统计手段来处理，而需要使用甚至引入一些非传统的数学工具，例如，分数阶微积分、连续时间无规行走等. ②为了理解多自由度系统 (实际上，在统计动力学中，引入涨落和噪声就大为降低了问题的维数) 不可逆性的基本行为，本质上并不真正需要量子力学，也就是说，经典描述已经可以囊括问题的主要方面. 当然，这并不是说量子力学不重要，它在处理高温和低温超导体、超流体、自旋玻璃等的输运问题中是不可或缺的，可能一些重要问题遗憾地被本书忽略了. ③对经典统计力学好的理解为向量子论的推广作了一个前期准备.

作者在写作风格上，借鉴了国内外书籍的成功经验，对可能引起混淆的问题多用标注的形式，以引起重视；在每章结束，尽量予以评注或小结，提纲挈领. 希望这本书能够帮忙帮到点子上：为方便读者的自学，本着越基本越好，解析的例子越多越好的原则，注意知识之间的内在逻辑性，外在关联性. 情况往往是这样的，大段的和严密的理论推演也许难以使新手理解和运用模型，而一些简单的实例往往会使读者茅塞顿开. 所以本书某些章节还安排了一定数量的习题，它们是书中重要内容的补充和应用. 读者不妨花费少许的时间动动手.

衷心感谢中国原子能科学研究院张焕乔院士、卓益忠研究员、刘祖华研究员，中国科学院大气物理研究所吴国雄院士、刘屹岷研究员，中国科学院理论物理研究所赵恩广研究员、周善贵研究员，北京理工大学邢修三教授，北京大学张启仁教授、许甫荣教授，清华大学朱胜江教授，南京大学任中洲教授，北京师范大学杨展如教授、胡岗教授、杨国健教授，中国科学院上海应用物理研究所方海平研究员，河北工业大学纪青教授，德国奥格斯堡大学 P. Hänggi 教授，日本京都大学 Y. Abe 教授，法国国家重离子实验室 D. Boilley 教授，巴西的巴西利亚大学 F. A. Oliveira 教授对作者在扩散理论与应用研究的帮助以及对本书出版的支持，以及我的博士研究生王海燕、白占武、吕坤、林方、张小鹏、贾颖、周妍、覃莉、卢宏、赵江林、宋艳丽、王春阳、上官丹骅、吕艳等在此课题上与我的合作.

本书得到中国科学院科学出版基金的资助. 另外，还要感谢国家自然科学基金 (11175021、10875013、10674016、10235020)、教育部博士点基金 (200827005、200527001)、中国科学院知识创新工程 (KZCX2-YW-Q11-01)、德国学术交流中心 (DAAD) 和日本学术振兴会 (JSPS) 对作者的本书所涉及研究的支持.

由于作者学识所限，难免挂一漏万，甚至会有不当之处，望读者不吝指出.

包景东

于北京师范大学物理系

2011 年 12 月

目　　录

第 1 章　随机变量和概率分布

本章导读：为后续内容做好铺垫，介绍随机变量及概率分布的性质，特别是阐述广义中心极限定理及其物理价值. 讨论马尔可夫过程，并用之解释微观动力学过程具有时间反演不变性，而宏观过程不可逆性的起因.

1.1　统计动力学的任务

众所周知，物质的宏观状态由组成它的微观客体的运动与行为所决定，而微观客体 (如分子、原子、电子和原子核)满足一定的力学规律也包括电磁规律. 然而, 由于微观个体的数目和自由度的巨大，很难由力学方程直接给出物质的特性，所以，人们更加关心微观客体长时间后按位型、速度和能量的分布. 统计力学的任务就是提供一个连接微观和宏观世界的桥梁，认为宏观量是相应微观量的统计平均值. 反常统计动力学是非平衡统计力学的新发展，当前统计物理的一个热点问题就是反常扩散.

本书研究的主要课题是一个动力系统的随时演化，称为动力学①. 注意这里的动力系统概念比“系统是包含一定量的物质”的直观理解更广泛，它能适用于非物质体系，例如，辐射. 在近代非线性物理中，动力系统的意义是简洁明了的，即确定某些时间的数学函数演化的一组方程. 往往用 N 个试验粒子来描写一个系统的统计行为，而其中每个粒子的运动方程是已知的. 本书涉及的分数阶统计具有两层含义：一是指在描写系统随时演化的控制方程中包含分数阶导数或噪声谱密度在低频区正比于频率的分数幂，导致非指数弛豫；二是长时间后系统达到偏离玻尔兹曼–吉布斯平衡的稳定分布，概率密度函数中尾部按分数幂律衰减. 揭示何种系统具有这样的现象，并恰当地描述它们以及探讨其物理机制和效应是反常统计动力学的挑战性课题.

在着手对任何动力系统进行仔细研究之前，需确定三个基本要素：态、动力学函数和演化规律. 其中，一个系统的状态是由一组固定的最少的基本物理量来确定；态变量的函数或泛函称为动力学函数；演化律是为了完成系统的描述.

① 与动力学 (dynamics) 平行的另外一个词是动理学 (kinetic) 理论，后者研究的对象是单粒子分布函数及其随时间的演化. 动理学基本方程是玻尔兹曼方程，目的在于解释和计算原子分子 (或准粒子) 的碰撞 (散射) 所产生的输运过程和耗散效应.

1.2 一般定义

经典概率论和随机过程的基础知识能够在许多教科书中找到. 现仅对一些特别有用, 却可能不为人们所熟悉的随机变量的性质作一个简介和评注，大多数情况下也适用于反常扩散和分数阶统计.

随机变量及其分布 随机变量为一组可能的值 $\{x_i\}$，这组值满足一个分布 $P(x)$，而后者必需满足非负和归一化: (i) $P(x) \geqslant 0$；(ii) $\int P(x)\mathrm{d}x = 1$ (除此之外无其他要求，例如，不要求连续、可导和无奇点等). 物理学家更喜欢用系综来代替一个概率分布，而不是考虑具有一个概率分布的单一量，他们引入一组假想的具有任意大数目的 N 个量，在一个给定区域，它们具有不同的值，在 x 至 $x+\mathrm{d}x$ 之间它们的数目为 $NP(x)\mathrm{d}x$. 从而，概率分布被一个大量样本的密度函数所代替. 这并不影响结果而计算却是十分方便的，例如，试验粒子方法.

概率分布的另外一种描写方式是用 $\tilde{P}$，变量 X 取小于 x 的任何值的总概率，$\tilde{P}(x) = \int_{-\infty}^{x} P(x)\mathrm{d}x$，代替 $P(x)$. 数学上严格地讲, $P(x)$ 称为概率密度，$\tilde{P}(x)$ 为分布密度函数；物理上，$\tilde{P}(x)$ 称为累积分布函数，概率密度 $P(x)$ 的意义是，$P(x)\mathrm{d}x$ 为发现粒子在 $[x, x+\mathrm{d}x]$ 区域的概率值，它一定不能简称为“概率函数”或“概率”.

随机变量的变换 给定一个 d维随机变量 X，用合适的变换 $Y = g(X)$ 能产生一个新的 f维随机变量 Y. Y 的概率密度由以下方程定出：

$$P_Y(y) = \int \mathrm{d}^d x \delta^{(f)}[y - g(x)] P_X(x), \tag{1.1}$$

式中，$\delta^{(f)}$ 代表 f 维 δ 函数. 例如，两个随机变量的和 $Y = X_1 + X_2$ 的变换关系是 $g(x_1, x_2) = x_1 + x_2$, 若 X_1 和 X_2 是独立的，有

$$P_Y(y) = \int \mathrm{d}x_1 P_{X_1}(x_1) P_{X_2}(y - x_1), \tag{1.2}$$

即 Y 的密度是 X_1 和 X_2 的密度的卷积.

另一例子 $d = 3$、$f = 1$，将关于 $X = (v_x, v_y, v_z)$ 的麦克斯韦速度分布变换到能量变量 $E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$:

$$\begin{aligned} P(E) &= \int \delta\left(\frac{1}{2}mv^2 - E\right)\left(\frac{m}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{3/2} \mathrm{e}^{-mv^2/(2k_{\mathrm{B}}T)} \mathrm{d}v_x \mathrm{d}v_y \mathrm{d}v_z \\ &= 2\pi^{-1/2}(k_{\mathrm{B}}T)^{-3/2}\mathrm{e}^{1/2}\mathrm{e}^{-E/k_{\mathrm{B}}T}. \end{aligned} \tag{1.3}$$

在特殊情况下，仅一个 X 对应于每个 Y，因此需要 $d=f$，$Y=g(X)$，则 Y 的概率密度为

$$P_Y(y)=P_X(x)|J|, \tag{1.4}$$

式中，$|J|$ 是变换雅可比行列式的绝对值. 或者，$P_Y(y)\mathrm{d}^d y=P_X(x)\mathrm{d}^d x$.

设随机变量的分布密度函数为 $f(x)$，现对其进行不定 (上界) 积分：$F(x)=\displaystyle\int_a^x f(x')\mathrm{d}x'$，数学上也称作原函数，则 $\mathrm{d}F(x)/\mathrm{d}x=f(x)\geqslant 0$，且 $F(x)$ 的分布密度函数为

$$P(F(x))=f(x)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}F(x)}=f(x)\frac{1}{\dfrac{\mathrm{d}F(x)}{\mathrm{d}x}}=1\quad(0\leqslant F(x)\leqslant 1).$$

这意味着累积分布函数为一个 $[0,1]$ 区间的均匀分布密度函数. 事实上，这正是在计算统计物理 (蒙特卡罗方法) 中，由已知分布直接产生随机变量样本的依据. 令 ξ 是一个 $[0,1]$ 区间均匀分布的随机数，假设原函数可解析积分出且其反函数存在显式，从而

$$F(X_f)=\int_a^{X_f} f(x')\mathrm{d}x'=\xi,\quad X_f=F^{-1}(\xi). \tag{1.5}$$

故由均匀分布随机数可以产生非均匀分布随机数①.

例 1.1 粒子迁移的自由程服从如下的指数分布：

$$f(x)=\lambda\mathrm{e}^{-\lambda x}\quad(x\geqslant 0), \tag{1.6}$$

式中，λ 是粒子在介质中穿透 x 距离后，所在位置的宏观总截面.

解：对 (1.6) 式进行随机抽样, 令

$$\int_0^{X_f}\lambda\mathrm{e}^{-\lambda x}\mathrm{d}x=1-\mathrm{e}^{-\lambda X_f}=\xi,$$

则

$$X_f=-\frac{1}{\lambda}\ln(1-\xi)=-\frac{1}{\lambda}\ln\xi.$$

这里，认为 $1-\xi=\xi$，是因为两者具用相同的分布，在统计意义上是“相等”的.

条件概率　在事件 A_2 出现的前提下，事件 A_1 出现的概率称为条件概率，存在如下的恒等式:

$$\mu(A_1|A_2)=\frac{\mu(A_1,A_2)}{\mu(A_2)}. \tag{1.7}$$

①蒙特卡罗方法有许多方案实现由已知分布抽样，例如，舍选法、乘分布法、加分布法等，所获取的子样集合在概率意义上严格符合给定分布密度函数.

贝叶斯 (Bayes) 定理：$\mu(A_1|A_2)\mu(A_2)=\mu(A_2|A_1)\mu(A_1)$. 这里，$\mu(A_1,A_2)$ 称为联合概率，$\mu(A_1)$ 和 $\mu(A_2)$ 称为边缘概率.

传播子　对于任何随机过程，不必是马尔可夫 (Markovian) 过程，$p_{1|1}(x,t|x',t')$ 等于该过程在早些时刻 t' 取 x' 值的条件下，过程在时刻 t 时取 x 值的概率. 这个条件概率被当作跃迁概率或简单地命名为传播子. 引入记号:

$$T(x,t|x',t')=p_{1|1}(x,t|x',t'). \tag{1.8}$$

传播子具有如下的性质:

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}xT(x,t|x',t')=1,\\ \lim_{t\to t'}T(x,t|x',t')=\delta(x-x').\end{aligned} \tag{1.9}$$

概率密度 $p(x,t)$ 通过一个明显的方式与时刻 t_0 的概率密度相联系

$$p(x,t)=\int \mathrm{d}x'T(x,t|x',t_0)p(x',t_0). \tag{1.10}$$

稳定过程　若一个随机过程的所有联合概率密度在时间平移下均是不变的，则该随机过程是稳定的，也就是对于所有的 τ, 有

$$p_m(x_m,t_m+\tau;\cdots;x_1,t_1+\tau)=p_m(x_m,t_m;\cdots;x_1,t_1). \tag{1.11}$$

实际上，稳定意味着概率密度 p 与时间无关，$p(x,t)=p(x)$，并且传播子 $T(x,t|x',t')$ 仅依赖于时间的增量 $t-t'$.

均匀过程　如果传播子仅依靠时间增量，则这个过程被称为均匀的. 一个稳定过程在时间上一定是均匀的，但均匀过程并不是稳定的.

例如，维纳过程 $Z(t)=\int_0^t\xi(t')\mathrm{d}t'$，$\xi(t)$ 是一个白噪声，其均值为零，关联 $\langle\xi(t)\xi(t')\rangle=2D\delta(t-t')$，那么 $Z(t)$ 的关联为 $\langle Z(t)Z(t')\rangle=2D\int_0^t\int_0^{t'}\delta(s-s')\mathrm{d}s\mathrm{d}s'=2D\min(t,t')$，不是一个时间平移不变量.

关联函数　随机变量 $Y(t)$ 包含几个分量 $Y_j(t)$ $(j=1,2,\cdots,r)$. 关联矩阵定义为

$$K_{ij}(t_1,t_2)=\langle\langle Y_i(t_1)Y_j(t_2)\rangle\rangle=\langle Y_i(t_1)Y_j(t_2)\rangle-\langle Y_i(t_1)\rangle\langle Y_j(t_2)\rangle. \tag{1.12}$$

对角元称为自关联，非对角元称为交叉关联. 经常存在一个常数时间 τ_c，当 $|t_1-t_2|>\tau_\mathrm{c}$，$K_{ij}(t_1,t_2)$ 等于零，则 τ_c 称为关联时间. 对于一个零平均稳定过程，矩阵元为 $K_{ij}(\tau)=\langle Y_i(t)Y_j(t+\tau)\rangle=\langle Y_i(0)Y_j(\tau)\rangle$.

例 1.2 求自由布朗粒子的速度关联函数.

解：根据牛顿第二定律：$m\dot{v}(t)=\sum F$，这里的合外力一般包括势场力、阻尼力和无规力 (噪声)，则描写自由粒子的运动为如下的朗之万方程：

$$m\dot{v}=-\gamma v+\xi(t), \tag{1.13}$$

式中，$\xi(t)$ 变化很快, 是不规则和未知的，只能考虑它的系综平均, 平均值等于零，即 $\langle\xi(t)\rangle=0$；如果布朗粒子受分子两次碰撞的时间远短于其他时间尺度，就可以用 δ 函数近似地表示无规力关联，$\langle\xi(t)\xi(t')\rangle=2\gamma k_{\mathrm{B}}T\delta(t-t')$.

把方程 (1.13) 右端最后一项无规力 $\xi(t)$ 看成一个源，则一阶常系数微分方程的通解为

$$v(t)=v_0\exp\left(-\frac{\gamma t}{m}\right)+\frac{1}{m}\exp\left(-\frac{\gamma t}{m}\right)\int_0^t\exp\left(\frac{\gamma s}{m}\right)\xi(s)\mathrm{d}s, \tag{1.14}$$

式中，v_0 系 $t=0$ 粒子的初始速度. 粒子的速度关联函数为

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle=v_0^2\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}+\frac{2\gamma k_{\mathrm{B}}T\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}}{m^2}\int_0^{t_1}\int_0^{t_2}\mathrm{e}^{\frac{\gamma}{m}(s_1+s_2)}\delta(s_1-s_2)\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2. \tag{1.15}$$

参考图 1.1，若 $t_1\neq t_2$，对 δ 函数的积分，我们先完成 t_1 和 t_2 两者较大的一重积分，有

$$\begin{aligned}\langle v(t_1)v(t_2)\rangle&=v_0^2\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}+\frac{2\gamma k_{\mathrm{B}}T}{m^2}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}\\&\quad\times\int_0^{\min(t_1,t_2)}\int_0^{\max(t_1,t_2)}\mathrm{e}^{\frac{\gamma}{m}(s_1+s_2)}\delta(s_1-s_2)\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2\\&=v_0^2\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}+\frac{2\gamma k_{\mathrm{B}}T}{m^2}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}\int_0^{\min(t_1,t_2)}\mathrm{e}^{2\frac{\gamma}{m}s}\mathrm{d}s\\&=v_0^2\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}+\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}[t_1+t_2-2\min(t_1,t_2)]}-\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}\right\}\\&=\left(v_0^2-\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t_1+t_2)}+\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}|t_1-t_2|}.\end{aligned} \tag{1.16}$$

结果显示：若 $t_1+t_2\gg\left(\dfrac{\gamma}{m}\right)^{-1}$，则速度关联函数仅是 $|t_1-t_2|$ 的函数，具有时间平移不变性；若粒子的速度初始处于热平衡分布，即 $\{v_0^2\}=\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{m}$，我们对上式再取初始平均 (用符号 $\{\cdots\}$ 表示)：$\{\langle v(t_1)v(t_2)\rangle\}=\dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\exp\left(-\dfrac{\gamma}{m}|t_1-t_2|\right)$，则这种情况下的粒子速度时时具有稳定性.

Wiener-Khinchin 定理　一个稳定随机变量 $\xi(t)$ 的谱密度 $S(\omega)$ 为它的自关联函数 $\kappa(\tau)=\langle\xi(\tau)\xi(0)\rangle$ 的余弦变换，即

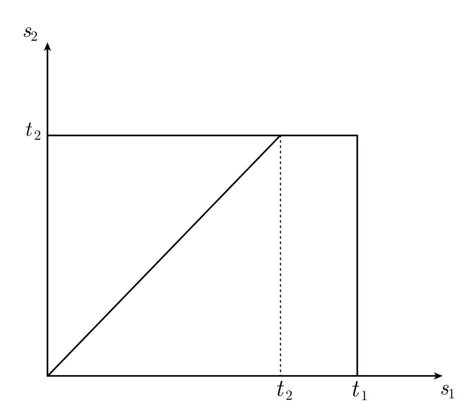


图 1.1　若 $t_1 \geqslant t_2$，则在 (1.15) 式中积分的积分区域，这个积分仅在 $s_2 = s_1$ 线上不等于零

$$S(\omega) = 2\int_0^\infty \cos(\omega\tau)\kappa(\tau)\mathrm{d}\tau = \int_{-\infty}^\infty \exp(\mathrm{i}\omega\tau)\kappa(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{1.17}$$

其逆傅里叶变换给出关联函数.

对于一个高斯随机过程，人们仅需知道谱密度或关联函数，则其所有分布函数均能被确定. 这种方法称为*里斯 (Riesz) 方法*①.

噪声三要素　无论内噪声还是外噪声，首先是无偏的, 即平均值等于零，其主要由以下要素确定.

第一要素：强度. 对内噪声而言，这个量正比于温度，而对外噪声，经常用自由粒子的扩散系数所度量.

第二要素：谱. 其决定了噪声的“颜色”性，谱函数的逆傅里叶变换的实部为噪声关联函数. 一个随机变量能被当作噪声，其必须是一个平稳过程，即在不同时间的关联仅是两时刻差的绝对值的函数, 也就是具有时间平移不变性. 特别是噪声谱的零频行为决定了系统长时间的动力学渐近结果.

第三要素：分布. 通常假设噪声满足高斯分布, 所以称为高斯噪声. 近年来非高斯分布噪声引起了人们极大的兴趣, 例如, 莱维 (Lévy) 噪声，其具有一个长拖尾，二次矩发散，它的定义是通过分布的傅里叶变换, 即特性函数 $p(k)$ 来完成的，

$$p(k) = \int_{-\infty}^\infty \exp(-\mathrm{i}k\xi)p(\xi)\mathrm{d}\xi = \exp(-D|k|^\mu), \quad 0 < \mu < 2.$$

此外，谱分布可以随噪声强度的改变而变化，例如，用一个高斯白噪声驱动一个过阻尼粒子在双势阱运动. 粒子坐标的稳态分布具有双峰结构，随着噪声强度的增

①Wang M C，Uhlenbeck G E. On the theory of the Brownian motion II. Rev Mod Phys, 1945, 17: 323；另外一篇关于布朗运动朗之万理论的经典文章: Chandrasekhar S. Stochastic problems in physics and astronomy. Rev Mod Phys, 1943, 15:1.

大，势垒作用消失，则粒子分布将转变成单峰. 这提示我们将粒子的坐标变量作为一个噪声输出，再去驱动其他动力系统.

不同类型的谱 (显示在图 1.2) 对应不同类型的过程. 例如：

(1) 包含了各种色噪声的白噪声谱为一常量，其平均和关联函数分别为

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\delta(t-t'),$$

式中，D 是扩散系数. 这对应于一个纯粹的随机过程，即两任意时刻的随机事件无任何关系，无疑这是一个极限情况，实际中不能发生.

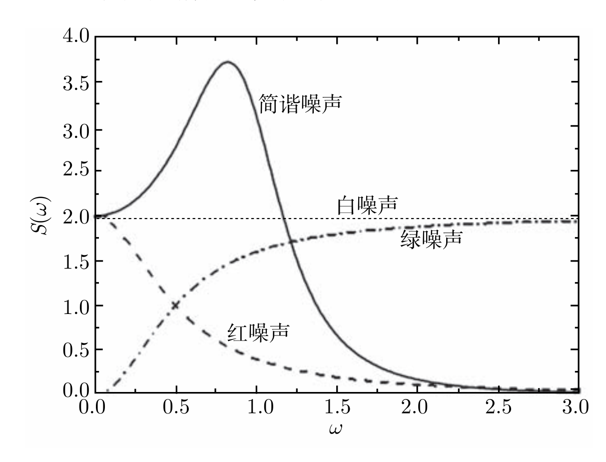


图 1.2　几种常见噪声的谱密度. 所用的参数是：$D = 1.0$，$\tau_{\rm c} = 2.0$，$\varGamma = 0.8$，$\varOmega = 1.0$

(2) 红噪声 $y(t)$，可用一白噪声驱动一阶线性微分方程的坐标变量来产生：

$$\dot{y}(t) = -\frac{1}{\tau_{\rm c}}y(t) + \frac{1}{\tau_{\rm c}}\xi(t), \tag{1.18}$$

关联函数和谱密度分别为

$$\langle y(t)y(t') \rangle = \frac{D}{\tau_{\rm c}}\exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau_{\rm c}}\right), \quad S(\omega) = \frac{2D}{1+\omega^2\tau_{\rm c}^2}.$$

式中，$\tau_{\rm c}$ 是噪声关联时间. 该噪声具有低通高阻的特性.

(3) 准单色简谐噪声，用一个白噪声 $\xi(t)$ 驱动一个阻尼谐振子 (阻尼为 $\varGamma$，振子频率为 $\varOmega$)，其坐标 $\varepsilon(t)$ 作为一个噪声变量，即

$$\ddot{\varepsilon} + \varGamma\dot{\varepsilon}(t) + \varOmega^2\varepsilon(t) = \xi(t), \tag{1.19}$$

其中，白噪声满足：$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2D\varOmega^4\delta(t-t')$. 这里之所以将白噪声的关联写成如此的形式，是因为便于这种噪声能退化到红噪声和白噪声. 噪声关联函数和谱密度分别是

$$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle=\frac{D\Omega^4}{\mu_1^2-\mu_2^2}\left[\frac{1}{\mu_1}\mathrm{e}^{\mu_1|t-t'|}-\frac{1}{\mu_2}\mathrm{e}^{\mu_2|t-t'|}\right], \tag{1.20}$$

$$S(\omega)=\frac{2D\Omega^4}{\Gamma^2\omega^2+(\omega^2-\Omega^2)^2}. \tag{1.21}$$

式中，μ_1 和 μ_2 是方程 $\mu^2+\Gamma\mu+\Omega^2=0$ 的两个根. 可见该噪声具有带通作用，且在一个有限频率处达到极大.

(4) 若随机变量的谱密度积分发散，意味着这个量的二次矩的长时间值发散，因此，人们往往采取高频截断的处理，例如，德拜谱和非欧姆谱.

例 1.3 试求出红噪声的时间导数的关联函数及其谱.

解： 红噪声产生过程 (1.18) 式的坐标和速度变量的解分别为

$$y(t)=\exp\left(-\frac{t}{\tau_\mathrm{c}}\right)y(0)+\frac{1}{\tau_\mathrm{c}}\int_0^t\exp\left(\frac{s-t}{\tau_\mathrm{c}}\right)\xi(s)\mathrm{d}s,$$

$$\dot{y}(t)=-\frac{1}{\tau_\mathrm{c}}\exp\left(-\frac{t}{\tau_\mathrm{c}}\right)y(0)+\frac{1}{\tau_\mathrm{c}}\left[\xi(t)-\frac{1}{\tau_\mathrm{c}}\int_0^t\exp\left(\frac{s-t}{\tau_\mathrm{c}}\right)\xi(s)\mathrm{d}s\right].$$

那么，变量 $\dot{y}(t)$ 的关联函数是

$$\begin{aligned}\langle\dot{y}(t)\dot{y}(t')\rangle=&\frac{1}{\tau_\mathrm{c}^2}\mathrm{e}^{-\frac{t+t'}{\tau_\mathrm{c}}}y^2(0)+\frac{1}{\tau_\mathrm{c}^2}\langle\xi(t)\xi(t')\rangle\\&+\frac{1}{\tau_\mathrm{c}^4}\int_0^t\int_0^{t'}\mathrm{e}^{\frac{s+s'-t-t'}{\tau_\mathrm{c}}}\langle\xi(s)\xi(s')\rangle\mathrm{d}s\mathrm{d}s'\\&-\frac{1}{\tau_\mathrm{c}^3}\left[\int_0^t\mathrm{e}^{\frac{s-t}{\tau_\mathrm{c}}}\langle\xi(s)\xi(t')\rangle\mathrm{d}s+\int_0^{t'}\mathrm{e}^{\frac{s'-t'}{\tau_\mathrm{c}}}\langle\xi(s')\xi(t)\rangle\mathrm{d}s'\right],\end{aligned} \tag{1.22}$$

以上等式右边的第二项为：$\dfrac{2D}{\tau_\mathrm{c}^2}\delta(t-t')$，第三项的求法类似于例 1.2，结果是

$$\frac{1}{\tau_\mathrm{c}^4}\int_0^t\int_0^{t'}\mathrm{e}^{\frac{s+s'-t-t'}{\tau_\mathrm{c}}}\langle\xi(s)\xi(s')\rangle\mathrm{d}s\mathrm{d}s'=\frac{D}{\tau_\mathrm{c}^3}\mathrm{e}^{-\frac{|t-t'|}{\tau_\mathrm{c}}}-\frac{D}{\tau_\mathrm{c}^3}\mathrm{e}^{-\frac{t+t'}{\tau_\mathrm{c}}},$$

在 (1.22) 式右边第四项括号内，如果设 $t>t'$，那么首项积分为 $2D\exp(-|t-t'|/\tau_\mathrm{c})$，末项积分等于零，这是因为被积变量 $s'\in[0,t']$，在 $\delta(s'-t)$ 中不能取 $s'=t$；若设 $t<t'$，则结果与 $t>t'$ 情况相反. 所以，(1.22) 式成为

$$\langle\dot{y}(t)\dot{y}(t')\rangle=\frac{1}{\tau_\mathrm{c}^2}\left[y^2(0)-\frac{D}{\tau_\mathrm{c}}\right]\mathrm{e}^{-\frac{t+t'}{\tau_\mathrm{c}}}+\frac{2D}{\tau_\mathrm{c}^2}\delta(t-t')-\frac{D}{\tau_\mathrm{c}^3}\mathrm{e}^{-\frac{|t-t'|}{\tau_\mathrm{c}}}. \tag{1.23}$$

进一步设变量 $y(t)$ 在初始时刻满足一个高斯分布，其二次矩为 $\{y^2(0)\}=\dfrac{D}{\tau_\mathrm{c}}$，则 (1.23) 式右边第一项消失，其仅是两时间差 $|t-t'|$ 的函数，从而速度变量 $\dot{y}(t)$ 是一个稳定过程，可以当作噪声使用.

噪声 $\dot{y}(t)$ 的谱密度为

$$S_{\dot{y}}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\{\langle\dot{y}(t)\dot{y}(0)\rangle\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t$$
$$=\frac{2D}{\tau_{\mathrm{c}}^2}-\frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}^2}\frac{2D}{1+\omega^2\tau_{\mathrm{c}}^2}=\frac{2D\omega^2}{1+\omega^2\tau_{\mathrm{c}}^2}. \tag{1.24}$$

可见，这种色噪声具有低阻高通的功能，称为绿噪声. 从其谱密度的表示式可见，它是白谱减去红谱，但并不能用一个白噪声与一个红噪声的差来产生.

马尔可夫过程 通俗地讲，该过程的特征为“现在的将来只与现在有关，而与历史无关”. 其在自然科学中发挥着重要作用，原因有三点：① 只要人们选择一组合适的变量，许多重要的过程就是马尔可夫过程；②通过合适的态空间的扩展，许多随机过程可以变成马尔可夫过程；③马尔可夫过程在数学上相对容易描述和处理.

本质上，马尔可夫过程是一个无长程记忆的随机过程，或者说，它对过去的历史快速地忘记. 记忆快速降低效应可以根据条件联合密度用公式表示：

$$\mu(X(t)\in B|X(t_m)=x_m,\cdots,X(t_1)=x_1)=\mu(X(t)\in B|X(t_m)=x_m). \tag{1.25}$$

这就是马尔可夫条件，它对所有的 $m=1,2,3,\cdots$ 在时间编序 $t_1<t_2<\cdots<t_m<t$ 下都成立.

定义条件概率

$$p_{l|k}(x_{k+l},t_{k+l};\cdots;x_{k+1},t_{k+1}|x_k,t_k;\cdots;x_1,t_1)\equiv\frac{p_{k+l}(x_{k+l},t_{k+l};\cdots;x_1,t_1)}{p_k(x_k,t_k;\cdots;x_1,t_1)}, \tag{1.26}$$

则马尔可夫条件可以写成

$$p_{1|m}(x,t|x_m,t_m;\cdots;x_1,t_1)=p_{1|1}(x,t|x_m,t_m). \tag{1.27}$$

1.3 无规行走、正常扩散

让我们考虑一个一维行走者，其按照一个给定的分布 $p(l)$，每次独立地完成一次长度为 l_n 的跳跃，经过 N 步，即在时刻 $t=N\tau$，它的位置是 N 次独立位移之和

$$X_t=\sum_{n=1}^{N}l_n. \tag{1.28}$$

假如 $p(l)$ 的前两次矩 $\langle l\rangle$ 和 $\langle l^2\rangle$ 有限，则位置的平均和方差将线性地依赖于时间，

$$\bar{X}_t=Vt,\quad \overline{X_t^2}-\bar{X}_t^2=2Dt, \tag{1.29}$$

而速度和扩散系数为

$$V = \langle l \rangle / \tau, \quad D = (2\tau)^{-1}[\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2]. \tag{1.30}$$

这是著名的有偏布朗扩散运动，即正常扩散. 但只要位移的方差 (或它的平均) 不再随时间线性地增长，就称之为反常扩散 (或漂移).

刻画随机行走更准确的特征是由中心极限定理所提供. 其表述为：当上述条件被满足时，有

$$P\left(u_1 \leqslant \frac{X_t - Vt}{2\sqrt{Dt}} \leqslant u_2\right) \xrightarrow[t\to\infty]{} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{u_1}^{u_2} \mathrm{e}^{-\xi^2} \mathrm{d}\xi, \tag{1.31}$$

上式括号 ( ) 中的不等式代表一个事件，上式含义为，该事件发生的概率值渐进收敛于右端的高斯定积分.

现给出这个概率论中的最重要结果的简要推导.

一旦实施一个参照系的变换，人们总能假设 $\langle l \rangle = 0$，即无偏，那么 X_t 具有 $\sqrt{N}$ 的行为, 变量 $X_t/\sqrt{N}$ 有一个极限分布, 其为

$$\int \cdots \int \prod_{n=1}^{N} p(l_n) \mathrm{d}l_n \delta \left(\frac{X_t}{\sqrt{N}} - N^{-1/2} \sum_{n=1}^{N} l_n\right), \tag{1.32}$$

利用 δ 函数的积分表示，以上分布写成

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kX_t/\sqrt{N}} \left(\int \mathrm{d}l p(l) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kl/\sqrt{N}}\right)^N. \tag{1.33}$$

这个表达式中的圆括号包含了 $p(l)$ 的傅里叶变换 $\hat{p}(k)$(即特性函数). 长时间后，由于 $|\hat{p}(k)| \leqslant 1$，那么 $\hat{p}(k)$ 的仅接近 $k=0$ 的行为才重要. 由于

$$\hat{p}(k/\sqrt{N})^N = \left[1 - \frac{1}{2}\langle l^2 \rangle k^2/N + O(N^{-3/2})\right]^N \xrightarrow[N\to\infty]{} \mathrm{e}^{-\langle l^2 \rangle k^2/2}, \tag{1.34}$$

完成对 k 的积分，导致高斯形式 (1.31) 式.

扩散过程的特征 一般来说，一个复杂系统的动力学能被考虑成一个代表点在相空间中的扩散. 具体地说，用一个分布密度函数刻画系统代表点在相空间的随机运动，其中心位置在势场力作用下发生漂移，而波包的宽度在涨落或噪声作用下展开或收缩, 就好像一滴墨汁在清水中的浓度扩散. 但是这里的扩散并不是颗粒物实体的运动形式. 例如，在核裂变理论中，将原子核裂变处理成布朗运动，即核表面由于受内部核子的无规碰撞, 则随机地形变，用一个朗之万方程来描述. 按照液滴模型，描写原子核从球形到分裂成两个碎片过程的几个形变参数视为广义坐标，

连同对应的广义动量张开一个相空间，一个代表点在相空间的不同位置就对应于原子核的一种可能形变.

分布函数的形态主要由它的前两次矩确定，即

$$V = \lim_{t\to\infty} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle X(t)\rangle,$$
$$D_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}\lim_{t\to\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\langle X_\alpha(t)X_\beta(t)\rangle - \langle X_\alpha(t)\rangle\langle X_\beta(t)\rangle], \tag{1.35}$$

式中，$\langle\cdot\rangle$ 代表对不同涨落路径求平均，这两个量还是依赖环境的. 当然，以上定义考虑的是正常扩散，但并不一定为高斯分布，若考虑势场的作用，则初始的一个波包随时间演化，将被分开成一些子波包，各个分布叠加的包络线前沿的宽度随时间线性增长，同样可以定义有效扩散系数. 如果破缺效应不是至关重要的，那么我们期待扩散系数是有限的，即非零也不是无限大.

若过程存在一个线性偏压力 F_0，则迁移与扩散之间满足爱因斯坦关系：

$$\langle X(t)\rangle = \frac{F_0}{2k_\mathrm{B}T}\langle X^2(t)\rangle. \tag{1.36}$$

其也适用于反常扩散，即存在偏压时，$\langle X(t)\rangle$ 不是时间的线性函数，同时方均位移也不随时间线性增长. (1.36) 式成立的条件是涨落耗散定理被满足.

1.4 平　　均

矩　一个随机变量的函数的平均定义为

$$\langle f(X)\rangle = \int_A^B f(x)P(x)\mathrm{d}x, \tag{1.37}$$

式中，B 和 A 为随机变量取值的上下限. 特别地，$\langle X^m\rangle \equiv \mu_m$ 称为变量 X 的 m 阶矩. 其中，μ_1 为平均，$\sigma^2 = \langle (X-\langle X\rangle)^2\rangle = \mu_2 - \mu_1^2$ 称为方差或偏差. 并不是所有概率分布都有一个有限的方差，一个例子是柯西 (Cauchy) 分布

$$P(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\gamma}{(x-a)^2+\gamma^2}, \quad -\infty < x < \infty. \tag{1.38}$$

实际上，在这个分布下，无偶次矩甚至积分定义的 μ_1 也不收敛, 但是从其对称性可以清楚地知道：平均值应为 $\mu_1 = a$.

特性函数　一个随机变量 x 的特性函数定义为

$$G_x(k) = \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\rangle = \int_l \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}P(x)\mathrm{d}x, \tag{1.39}$$

对所有的 k，其都存在，且有性质：

$$G_x(0) = 1, \quad |G_x(k)| \leqslant 1, \tag{1.40}$$

称为矩产生函数.

通过对这个特性函数的 n 阶微分，能获得变量 x 的 n 阶矩 μ_n：

$$\mu_n = \langle x^n \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \left. \frac{\mathrm{d}^n G_x(k)}{\mathrm{d}k^n} \right|_{k=0}. \tag{1.41}$$

所以，特性函数的泰勒展开由矩定出，

$$G_x(k) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}k)^n}{n!} \mu_n. \tag{1.42}$$

若知道所有矩，就能确定特性函数，而概率密度函数又是特性函数 $G_x(k)$ 的逆傅里叶变换:

$$P(x) = (2\pi)^{-1} \int G_x(k) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \mathrm{d}k. \tag{1.43}$$

通过这些关系，前 n 阶矩能用下面定义的前 n 阶累积表示，反之亦然. 两者到 $n = 4$ 的关系见习题 1.8.

累积　特性函数总是能扮演求出累积κ_n 的角色，或者通过一些关系中的一个来定义：

$$G_x(k) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}k)^n}{n!} \mu_n = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}k)^n}{n!} \kappa_n \right); \tag{1.44}$$

$$\ln G_x(k) = \ln\left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}k)^n}{n!} \mu_n \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}k)^n}{n!} \kappa_n, \tag{1.45}$$

故累积 κ_n 为

$$\kappa_n = \frac{1}{\mathrm{i}^n} \left. \frac{\partial^n \ln G_x(k)}{\partial k^n} \right|_{k=0}. \tag{1.46}$$

多变量分布　令 X 是一个有 r 个分量 $x_1, x_2, \cdots, x_r$ 的随机变量. 它的概率密度 $P_r(x_1, x_2, \cdots, x_r)$ 称为联合概率密度. 考虑一个 $s < r$ 子集 $x_1, x_2, \cdots, x_s$，其具有某值 $x_1, x_2, \cdots, x_s$ 的概率可以从整体联合概率密度函数对剩余变量的积分获得，即

$$P_s(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \int P_r(x_1, \cdots, x_s, x_{s+1}, \cdots x_r) \mathrm{d}x_{s+1} \cdots \mathrm{d}x_r, \tag{1.47}$$

称为子集的边缘分布.

另外，人们可将固定的值赋予 $x_{s+1}, \cdots, x_r$ 之上，然后考虑剩余变量 $x_1, x_2, \cdots,$ x_s 的联合概率，这称为 $x_1, x_2, \cdots, x_s$ 的边缘概率，当然是在 $x_{s+1}, \cdots, x_r$ 被指定定值的条件下. 边缘概率表示为

$$P_{s|r-s}(x_1, x_2, \cdots, x_s | x_{s+1}, \cdots, x_r). \tag{1.48}$$

贝叶斯定律：总的联合概率 P_r 等于边缘概率 P_{r-s} 乘以条件概率 $P_{s|r-s}$，通常也表示为

$$P_{s|r-s}(x_1, x_2, \cdots, x_s|x_{s+1}, \cdots, x_r) = \frac{P_r(x_1, \cdots, x_r)}{P_{r-s}(x_{s+1}, \cdots, x_r)}. \tag{1.49}$$

假设 r 个随机变量能被分成两组 $(x_1, \cdots, x_s)$ 和 $(x_{s+1}, \cdots, x_r)$，而且将 P_r 劈裂为

$$P_r(x_1, \cdots, x_r) = P_s(x_1, \cdots, x_s)P_{r-s}(x_{s+1}, \cdots, x_r), \tag{1.50}$$

则称这两组随机变量互相统计无关，其中的因子为

$$P_{s|s-r}(x_1, \cdots, x_s|x_{s+1}, \cdots, x_r) = P_s(x_1, \cdots, x_s).$$

一个多变量分布的矩为

$$\langle x_1^{m_1} x_2^{m_2} \cdots x_r^{m_r} \rangle = \int x_1^{m_1} x_2^{m_2} \cdots x_r^{m_r} P(x_1, x_2, \cdots, x_r) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \cdots \mathrm{d}x_r; \tag{1.51}$$

特性函数系 r 个辅助变数的函数，即

$$G(k_1, k_2, \cdots, k_r) = \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1 x_1 + k_2 x_2 + \cdots k_r x_r)} \rangle. \tag{1.52}$$

将特性函数关于 $(k_1, k_2, \cdots, k_r)$ 作泰勒展开，则产生矩

$$G(k_1, k_2, \cdots, k_r) = \sum_{m_1, \cdots, m_r = 0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}k_1)^{m_1} (\mathrm{i}k_2)^{m_2} \cdots (\mathrm{i}k_r)^{m_r}}{m_1! m_2! \cdots m_r!} \langle x_1^{m_1} x_2^{m_2} \cdots x_r^{m_r} \rangle. \tag{1.53}$$

1.5 中心极限定理

1.5.1 正常中心极限定理

令 $X_1, X_2, \cdots, X_N$ 是一组 N 个独立的随机变量，每个都有相同的零平均和有限方差 σ^2 的分布密度函数 $P_X(x)$，则它们如下合适标度的和变量:

$$Z = \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_r}{\sqrt{N}}, \tag{1.54}$$

也具有方差 σ^2，而当取极限 $N \to \infty$，和变量的分布密度函数为

$$P_Z(z) = [2\pi\sigma^2]^{-1/2} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma^2}\right). \tag{1.55}$$

这就是中心极限定理. 这个值得注意的事实告诉人们: 高斯分布在所有统计领域发挥主导作用.

为了得到这一结果，我们写出随机变量 X 的特性函数

$$G_X(k)=\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}P_X(x)\mathrm{d}x=1-\frac{1}{2}\sigma^2k^2+\cdots, \tag{1.56}$$

那么和变量 Z 的特性函数就是

$$G_Z(k)=\left[G_X\left(\frac{k}{\sqrt{N}}\right)\right]^N=\left[1-\frac{\sigma^2k^2}{2N}+\cdots\right]^N\to \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\sigma^2k^2}\quad (N\to\infty), \tag{1.57}$$

这的确是高斯分布 (1.55) 式的特性函数. 在 (1.57) 式中被省略的项来自于 $G_X(k/\sqrt{N})$ 中的 $N^{-3/2}$ 以上的高阶小项，在极限 $N\to\infty$ 下不起贡献.

例 1.4　已知 x 和 y 是两个独立的 $[0,1]$ 区间的均匀随机变量，求出 $z=x+y$ 的分布密度函数.

解：和变量 $z=x+y$ 的概率

$$F(z)=P(x+y<z),$$

代表在单位正方形内直线 $z=x+y$ 以下的面积. 若 $x+y<1$，在几何上，原函数 $F(z)$ 是等边长 z 的直角三角形的面积 (图 1.3(a))

$$F(z)=\frac{1}{2}z^2; \tag{1.58}$$

若 $x+y>1$，原函数 (图 1.3(b)) 为

$$F(z)=1-\frac{1}{2}(2-z)^2. \tag{1.59}$$

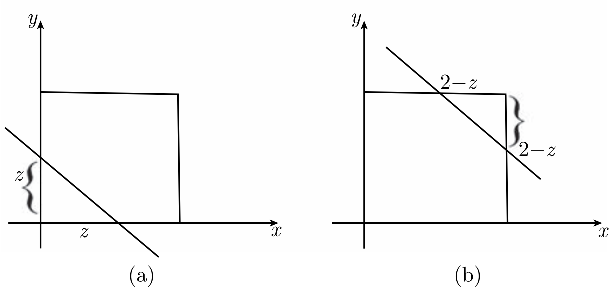


图 1.3　构造两个均匀随机变量之和的分布

利用分布密度函数是原函数的导数 $f(z)=\dfrac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}z}$，故 $f(z)$ 为

$$f(z)=\begin{cases} z & (0<z<1), \\ 2-z & (1\leqslant z<2). \end{cases} \tag{1.60}$$

可见两个均匀分布随机变量的和的分布不再是均匀的，而是一个三角形分布. 这是因为 x 和 y 同时取 0 和 1 附近值的概率小，但是有许多种可能使 $x+y$ 取新定义域中间的值，即 $z=1$ 的概率最大. 如果 $[0,1]$ 区间独立的均匀分布随机数之和数逐渐增多，那么和变量的分布将趋于高斯分布，见图 1.4.

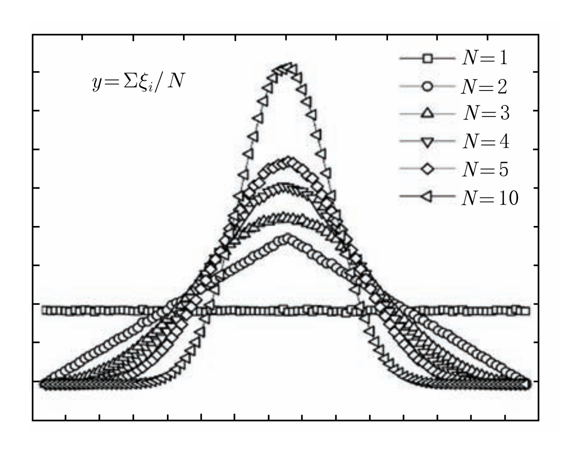


图 1.4　独立的 [0,1] 区间均匀分布随机数 ξ_i 之和的分布，可见当 $N\geqslant 4$ 时，和变量的分布就接近高斯函数

1.5.2　宽分布的中心极限定理

现在考虑具有宽分布 $p(l)$ 的独立随机变量 l_n 的和

$$X_N=\sum_{n=1}^{N}l_n, \tag{1.61}$$

当 N 很大时的极限分布. 比如分布 $p(l)$ 对于大 l，其降低的趋势比 l^{-3} 还慢. 这是概率论中的一个经典问题，这里基于简单的统计观点给出一个定性的描述.

让我们假设分布 $p(l)$ 在大 l 时按 $l^{-(1+\mu)}$ 的规律降低，这里 $\mu>0$ 保证可以归一化. 那么，

(1) 对于 $0<\mu<1$，X_N 典型地表现为 $N^{1/\mu}$(或者，当 $\mu=1$，行为是 $N\ln N$). 注意在这种情况下，$\langle l\rangle$ 是有限的，$\bar{X}_N$ 也是有限的；

(2) 对于 $1<\mu<2$，$\langle l\rangle$ 是有限的，$\bar{X}_N=\langle l\rangle N$ 也有限，而且 X_N 和 $\bar{X}_N$ 之间的差再一次具有行为 $N^{1/\mu}$(或者，当 $\mu=2$，行为是 $\sqrt{N\ln N}$). 注意方差 $\overline{X_N^2}-\bar{X}_N^2$ 却是无限的；

(3) 对于 $\mu>2$，$\langle l^2\rangle$ 为有限，这回到正常情况.

更准确的表述为：变量 $Z_N=X_N/N^{1/\mu}$ 对于 $0<\mu<2$，$(X_N-\langle l\rangle N)/N^{1/\mu}$，

当 $N\to\infty$ 有一个极限分布，那么 Z_N 取 (u_1,u_2) 之间某一值的概率是

$$\lim_{N\to\infty}P(u_1<Z_N<u_2)\to\int_{u_1}^{u_2}L_{\alpha,\beta}(u)\mathrm{d}u,\tag{1.62}$$

式中，极限分布 $L_{\alpha,\beta}(u)$ 由指数为 μ 的莱维或稳定律的特性函数来确定. 经过变换和扩展，它们由两个参数 μ 和 $\beta(0<\mu<2，-1\leqslant\beta\leqslant 1)$ 来刻画. 后者代表了不对称度，这依赖于在 (1.61) 式中大的正和负增量出现的相对频率. 精确地说

$$\frac{1-\beta}{1+\beta}=\lim_{L\to\infty}\frac{R(-L)}{1-R(L)},\quad R(L)=\int_{-\infty}^{L}p(l)\mathrm{d}l.\tag{1.63}$$

当 l_n 的大正值和大负值发生的频率相等，则给出 $\beta=0$ 的值. 实际上，$p(l)$ 为一个偶函数，那么 $L_{\mu,0}$ 也是一个偶函数，其有一个简单的傅里叶变换公式:

$$L_{\mu,0}(Z)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kZ-C|k|^{\mu}}.\tag{1.64}$$

当 $\mu=2$，回到正常的高斯分布；当 $\mu=1$ 为柯西分布，即

$$L_{1,0}(Z)=\frac{C}{\pi}\frac{1}{C^2+Z^2}.\tag{1.65}$$

当 l_n 仅取正值，则 $\beta=+1$，那么 $L_{\mu,1}$ 可方便地表示成一个拉普拉斯变换，

$$L_{\mu,1}(Z)=L_{\mu}(Z)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{d-\mathrm{i}\infty}^{d+\mathrm{i}\infty}\mathrm{d}s\mathrm{e}^{sZ-C's^{\mu}},\tag{1.66}$$

这里，在 $[0,+\infty)$ 以外，$L_{\mu,1}$ 为零.

稳定律 $L_{\alpha,\beta}(Z)$ 对于大 Z 按 $Z^{-(1+\mu)}$ 降低，大于或等于 μ 阶矩为无穷大. 它们的“吸引池”由那些分布 $p(l)$ 组成，对于大值 l，其行为与 $L_{\alpha,\beta}(Z)$ 本身相似. 这与标准律形成了对比，它吸引所有的分布 $p(l)$ 至少与 l^{-3} 一样快地降低. 它的吸引池是非常大的.

统计解释 以上和变量 X_N 的行为能以一个非常简单的方式来定量理解. 让我们去寻找什么是 N 项和所遇到的最大值 $l_{\mathrm{c}}(N)$，它被如下的等式所估计

$$N\int_{l_{\mathrm{c}}(N)}^{\infty}p(l)\mathrm{d}l=1.\tag{1.67}$$

这意味着一个大于 $l_{\mathrm{c}}(N)$ 的值至多在 $P(l)$ 的尾巴发生一次，这导致

$$l_{\mathrm{c}}(N)\sim N^{1/\mu},\quad N\to\infty.\tag{1.68}$$

对于一个大但有限的数 N，X_N 的值对于 $l\gg l_{\mathrm{c}}(N)$ 的事件是不敏感的；以致全分布 $p(l)$ 能在 $l\sim l_{\mathrm{c}}(N)$ 切断 (因为 $l\gg l_{\mathrm{c}}(N)$ 的区域不被抽样)，所以

(1) 对于 $0 < \mu \leqslant 1$，X_N 的典型值能被计算和的平均值来估计，切断有效分布

$$X_N \sim N \int^{l_c} lp(l)\mathrm{d}l \sim \begin{cases} N(N^{1/\mu})^{1-\mu} = N^{1/\mu} & (\mu < 1), \\ N \ln N & (\mu = 1). \end{cases} \tag{1.69}$$

(2) 对于 $1 < \mu \leqslant 2$，$X_N - \bar{X}_N$ 的典型值被估计为

$$(X_N - \bar{X}_N)^2 \sim N \int^{l_c} (l - \langle l \rangle)^2 p(l)\mathrm{d}l \sim \begin{cases} N(N^{1/\mu})^{2-\mu} = N^{2/\mu} & (1 < \mu < 2), \\ N \ln N & (\mu = 2). \end{cases} \tag{1.70}$$

(3) 对于 $\mu > 2$，(1.70) 式的积分当 $l_c \to \infty$ 时收敛, 粒子的方均位移具有 N 的线性增长性.

从以上分析，我们看到：当 $\mu < 2$ 时，和变量 X_N 的典型值主要由它的最大项 $l_c(N)$ 所确定，故 X_N 有一个边缘自相似属性 (整个和类似于一个单项).

1.5.3 中心极限定理的物理价值

微观过程不可微而宏观过程可微这一性质与中心极限定理的条件是有关系的. 在标准的中心极限定理中，被相加的量要求统计独立和同分布，且有一个有限的方差，这样和变量才是高斯的. 在一个动力系统中，如果微观过程的时间尺度远小于宏观过程的时间尺度，那么中心极限定理适用. 这种分离的时间尺度意味着微观动力学是稳定的，因为若动力学不稳定，则就有任意长的时间尺度. 一旦微观和宏观时间尺度可分离的条件满足，那么，在长时间极限下，微观动力学对细节的记忆就会消失，导致宏观高斯统计的结果. 这种时间尺度可分离性也表明宏观动力学能用通常的微分描写，即使微观动力学不适宜用常规方法来计算.

在微观与宏观描写中时间尺度不可分情形下，微观水平上不可微的记忆是无法被抑制的，那么输运方程就不能基于通常的微分计算来表述，即使人们仅关注宏观层次，这需要在朗之万方程中用分数阶时间导数代替一阶和二阶时间导数，以致获得一个分数阶微分随机方程描写物理观测量的动力学；不可微分性的另外一个后果是正常扩散的拉普拉斯算符要被一个分数阶拉普拉斯算符代替，从而导致关于系统的相空间的分数阶扩散方程.

1.6 马尔可夫过程

1.6.1 稳定马尔可夫过程的定义

对于稳定马尔可夫过程，跃迁概率 $P_{1|1}$ 并不依靠两个时间，而是与时间间隔有关，在这种情况下，引入记号

$$P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) = T_\tau(y_2|y_1), \quad \tau = t_2 - t_1. \tag{1.71}$$

1.6.2　Ornstein-Uhlenbeck 过程

用一个高斯白噪声 $W(t)$ 去驱动一个一阶线性微分方程:

$$\dot{Y}(t) = -\gamma Y(t) + W(t), \tag{1.72}$$

其解变量 $Y(t)$ 也满足高斯分布. 这描写的就是一个奥恩斯坦–乌伦贝克 (Ornstein-Uhlenbeck) 过程，简称 OU 过程.

例 1.5　求证 OU 过程是一个稳定的、高斯和马尔可夫过程.

证明：该过程定义为

$$W_1(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}; \tag{1.73}$$

$$P(y_2,\tau|y_1,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-\mathrm{e}^{-2\tau})}}\exp\left[-\frac{(y_2-y_1\mathrm{e}^{-\tau})^2}{2(1-\mathrm{e}^{-2\tau})}\right], \tag{1.74}$$

这个过程描述了一个自由布朗粒子的速度行为，即方程 (1.13) 的解.

令 $Y(t)$ 为一个稳定的高斯马尔可夫过程. 经过漂移和重新标度，我们能确保 $W_1(y)$ 等于 (1.73) 式. 跃迁概率是高斯的，假设具有以下的一般形式:

$$P(y_2,\tau|y_1,0) = D\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(Ay_2^2+2By_2y_1+Cy_1^2)}, \tag{1.75}$$

式中，系数 A、B、C、D 均是 τ 的函数. 对变量 y_2 而言，跃迁概率应满足归一化条件：

$$\int P(y_2,\tau|y_1,0)\mathrm{d}y_2 = 1,$$

应有 $D = \sqrt{A/(2\pi)}$ 和 $C = B^2/A$；而利用 $\int P(y_2,\tau|y_1,0)W_1(y_1)\mathrm{d}y_1 = W_1(y_2)$ 给出 $B^2 = A(A-1)$.

目前还有一个待定系数 A，它能用未知的关联函数 $\kappa(\tau)$ 来表示. 这里变量 $Y(t)$ 的自关联函数定义为

$$\kappa(\tau) = \iint y_1y_2P(y_2,\tau|y_1,0)W_1(y_1)\mathrm{d}y_1\mathrm{d}y_2 \quad (\tau \geqslant 0), \tag{1.76}$$

得到 $A = (1-\kappa^2)^{-1}$. 所以 (1.75) 式为

$$P(y_2,\tau|y_1,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-\kappa^2)}}\exp\left[-\frac{(y_2-\kappa y_1)^2}{2(1-\kappa^2)}\right]. \tag{1.77}$$

现在，考虑第三时间 $t_3 = t_2 + \tau'$ $(\tau' > 0)$，利用跃迁概率的递进关系：$P(y_3,\tau+\tau'|y_1,0) = \int P(y_3,\tau'+\tau|y_2,\tau)P(y_2,\tau|y_1,0)\mathrm{d}y_2$，有

$$\begin{aligned}\kappa(t_3-t_1) &= \int y_3\mathrm{d}y_3\int P(y_3,\tau'+\tau|y_2,\tau)\mathrm{d}y_2\int P(y_2,\tau|y_1,0)y_1W_1(y_1)\mathrm{d}y_1\\ &= \kappa(t_3-t_2)\kappa(t_2-t_1).\end{aligned} \tag{1.78}$$

这个关于 $\kappa(\tau)$ 的泛函关系显示：$\kappa(\tau) = \mathrm{e}^{-\tau}$，将之代入 (1.77) 式，就给出了 OU 过程的跃迁概率 (1.74) 式.

反之，如果 $Y(t)$ 是稳定的、高斯的，并且具有一个指数自关联函数 $\kappa(\tau) = \kappa(0)\mathrm{e}^{-\gamma\tau}$，则 $Y(t)$ 是一个 OU 过程，从而也是马尔可夫的.

1.6.3 几点注意

在物理文献中，“马尔可夫”一词经常被使用，可惜的是过于随意. 这个术语往往误导人们用直觉的判断而不是严格的定义. 读者要谨防下列的陷阱.

(1) 当一个物理学者谈论一个“过程”时，他自然要把它归于某个包含时间的现象. 关于这种定义的过程，除非指定一些变量用于过程的描述，否则，问它是不是马尔可夫的是无意义的. 物理学者的技巧是去发现那些变量，它们需要使得描述 (近似) 马尔可夫化.

(2) 马尔可夫过程的判据是针对所有层次的分布函数 P_n 的一个条件. 如果仅前几个 P_n 的信息是合适的，但却不可能断言一个过程是马尔可夫的. 另外，如果人们知道过程是马尔可夫的，则 P_1 和 $P_{1|1}$ 就足以刻画整个过程.

(3) 经常出现如下类型的方程

$$\dot{P}(y,t) = \Omega[P(y,t)],$$

式中，Ω 是一个作用在 y 相关函数之上的线性或非线性算符. 按照这个方程，在任何一个时刻 t_0 的 $P(y,t_0)$ 唯一地定出了所有 $t > t_0$ 时间的 $P(y,t)$. 从这一点上，有时会得出不正确的结论: $Y(t)$ 为一个马尔可夫过程. 首先，我们必须问 $P(y,t)$ 代表的是什么？如果它是概率密度函数 $P_1(y,t)$，那么上述方程也就告诉人们：$Y(t)$ 的单时间概率分布满足一个微分方程，但是没有给出有关高次分布函数进入马尔可夫过程的定义方程. 例如，对任何稳定过程，$\dot{P}_1(y,t) = 0$ 成立，然而，并不是所有稳定过程都是马尔可夫的.

另一方面，以上方程也许被认为的含义是：具有初始条件 $P(y,t_0) = \delta(y-y_0)$ 的任何解与跃迁概率 $P_{1|1}(y,t|y_0,t_0)$ 是相同的. 事实上，主方程就是这种类型，不过，它不能产生马尔可夫行为，因为它还是没有说出有关高次分布函数的任何事情.①

(4) 有时，基于 P 的所有早期值，$P(t)$ 的演化方程被描写为

$$P(t) = \int_0^t G(t,t')P(t')\mathrm{d}t', \tag{1.79}$$

式中，G 是一个 y 相关的线性算符. 将具有初始值 $P(y,0) = \delta(y-y_0)$ 的解表示

① 在主方程中的算符 Ω 应是线性的. 可以看出一个马尔可夫过程的跃迁概率不能满足一个非线性方程.

$P_{1|1}(y,t|y_0,0)$, 于是，人们从这个“非马尔可夫方程”得出结论: $Y(t)$ 不可能是一个马尔可夫过程. 然而，方程 (1.79) 并不意味着早期值 $P_{1|1}(y,t'|y_0,0)$ 是为了知道它将来的行为必不可少的.

1.7 宏观过程不可逆性的统计基础

为什么在可逆的力学方程中引入概率性假设就导致过程的不可逆呢？

动力学的时间反演不变性 为了获得对输运现象深入的理解，我们必须从严格的微观理论出发，即必须从流体的动力方程出发. 然而，这样我们就面临一个统计物理的基本难题：严格的动力学方程是可逆的，即在时间反演下

$$t \ \to \ -t, \quad q \to \ q, \quad p \ \to \ -p, \quad L \to -L \tag{1.80}$$

这里，L 为刘维尔 (Liouville) 算符，用其作用在一个分布密度函数 ρ 来定义：

$$L\rho = \mathrm{i}\{H,\rho\} = -\mathrm{i}\sum_j \left(\dot{q}_j \frac{\partial}{\partial q_j} + \dot{p}_j \frac{\partial}{\partial p_j}\right)\rho,$$

刘维尔方程 $\mathrm{i}\dfrac{\partial \rho}{\partial t} = L\rho$ 的形式保持不变. 也就是说，对一时间反演不变的系统，若把所有广义动量变向，则在正时间看到的现象与负时间方向看到的现象完全一样. 然而，输运过程是不可逆的或耗散的，即单个分子的运动是可逆的，而由大量分子组成的宏观系统的行为却是不可逆的. 图 1.5 显示了一个耗散动力系统的不可逆行为.

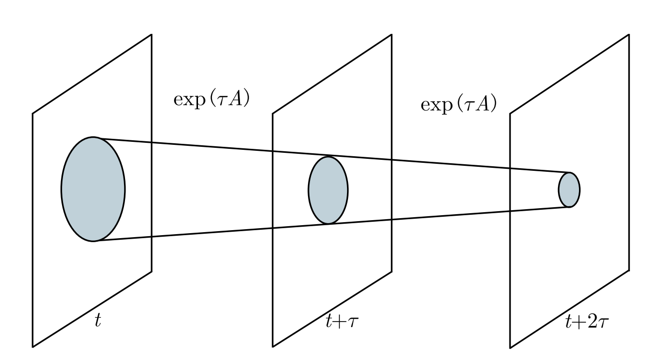


图 1.5 一个耗散动力系统不可逆特性示意图

1.7.1 马尔可夫层级关系

从基本观点出发，一个物理系统的过程，例如，气体趋近平衡态的过程，是受动力学规律支配的，而力学的运动方程式是确定性和连续性的. 但我们不能也不愿

对 10^{23} 个分子的运动作微观的计算，而是作出“可能性”的描述，那么采取的方法就是引入概率的观念. 由于气体分子碰撞数目之大及碰撞情形的各种可能性，故分子的态、变化频率是无规则的. 在此情况下，不得不作马尔可夫假设，例如，玻尔兹曼方程的碰撞积分项就是一个马尔可夫过程.

让我们再一次明确三个概率函数. 联合概率 $W_2(A_1, A_2)$：两个事件 A_1 和 A_2 同时发生的概率；边缘概率 $W_1(A_2)$：一个事件 A_2 出现的概率；条件概率：在事件 A_2 出现的前提下事件 A_1 出现的概率，用 $P(A_1|A_2)$ 来表示. 三者存在如下的关系：

$$W_2(A_1, A_2) = P(A_1|A_2)W_1(A_2), \tag{1.81}$$

亦满足贝叶斯定理：$P(A_1|A_2)W_1(A_2) = P(A_2|A_1)W_1(A_1)$.

现有一组事件 x_1, $x_2, \cdots$, x_m, x 是在时间编序 $t_1 < t_2 < \cdots < t_m < t$ 上发生的，则马尔可夫过程满足如下的条件：

$$P(x, t|x_m, t_m; x_{m-1}, t_{m-1}; \cdots ; x_1, t_1) = P(x, t|x_m, t_m). \tag{1.82}$$

一个马尔可夫过程完全被边缘分布 $W_1(x, t)$ 和跃迁概率 $P(x_2, t_2|x_1, t_1)$ 确定，这是因为整个层级由它们所构造. 这两个函数不能任意选取而必须满足以下两个等式：

$$P(x_3, t_3|x_1, t_1) = \int \mathrm{d}x_2 P(x_3, t_3|x_2, t_2)P(x_2, t_2|x_1, t_1); \tag{1.83}$$

$$W_1(x_2, t_2) = \int P(x_2, t_2|x_1, t_1)W_1(x_1, t_1)\mathrm{d}x_1. \tag{1.84}$$

反之亦然，即若两个非负函数 W_1 和 P 满足这两个方程，则就唯一地确定了一个马尔可夫过程.

1.7.2 概率假设的时间之箭

下面从马尔可夫过程来考察宏观过程不可逆的起因. 兹以 $w_k(t)$ 代表 t 时刻系统处于态 k 的概率，$P(j, t+\Delta t|k, t)$ 为 $\Delta t > 0$ 由 k 态转变到 j 态的概率. 那么，于 $t + \Delta t$ 时刻在态 j 发现系统的概率等于其他所有态跃迁到该处的概率之和，即

$$w_j(t+\Delta t) = \sum_k W_2(j, t+\Delta t; k, t) = \sum_k P(j, t+\Delta t|k, t)W_1(k, t).$$

为简便，我们将转移概率以矩阵元形式表示，则上式变成

$$w_j(t+\Delta t) = \sum_k A_{kj} w_k(t), \tag{1.85}$$

这里，A_{kj} 的意义是在 t 与 $t + \Delta t$ 时间内，由 k 态跃迁到 j 态的概率. 利用概率的归一化条件 $\sum\limits_k w_k(t) = 1$ 和 $\sum\limits_j w_j(t+\Delta t) = 1$，得知跃迁概率矩阵应满足

$$\text{(a)} \ \sum_j A_{kj} = 1, \quad \text{(b)} \sum_k A_{kj} = 1, \quad \text{(c)} \ 0 \leqslant A_{kj} \leqslant 1. \tag{1.86}$$

我们现证明方程 (1.85) 是不可逆的. 假设跃迁矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$，使得

$$w_k(t) = \sum_j A_{kj}^{-1} w_j(t + \Delta t), \tag{1.87}$$

那么，$\boldsymbol{A}^{-1}$ 具有如下的性质:

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I} \quad (\boldsymbol{I}\text{为单位矩阵}), \tag{1.88}$$

亦即

$$\sum_j A_{kj}^{-1} A_{jk} = 1, \tag{1.89}$$

$$\sum_j A_{kj}^{-1} A_{ji} = 0 \quad (k \neq i). \tag{1.90}$$

由 (1.89) 式和 (1.86) 式的第二式知，A_{kj}^{-1} 的矩阵元不可能都小于 1；由 (1.90) 式和 (1.86) 式的第三式知，该矩阵不可能所有的元素皆大于零. 那么，A_{kj}^{-1} 不能满足 (1.86) 式的第三个条件，因此，A_{kj}^{-1} 不具有跃迁矩阵元的性质.

我们可以由 t 时刻发现粒子的概率，通过跃迁概率而获得 $t+\Delta t$ 时刻粒子的概率，如同方程 (1.85). 然而，由 $t+\Delta t$ 的粒子概率，倒推 t 时刻粒子的概率，即方程 (1.87) 是无概率意义和不允许的. 故方程 (1.85) 的概率性假设是携带有时间之箭的，亦即表明宏观过程不可逆. 这就是为什么引入了概率性就相当于导致了不可逆的原因.

习　题

1-1 伽马分布的定义如下:

$$P(x) = \frac{a^\nu}{\Gamma(\nu)} x^{\nu-1} \mathrm{e}^{-ax} \quad (a > 0, \ \nu > 0, \ 0 < x < \infty).$$

令 $X_1, X_2, \cdots, X_r$ 是零平均和方差 σ^2 的独立高斯随机变量. 求证 $Y = X_1^2 + X_2^2 + \cdots + X_r^2$ 满足伽马分布.

1-2 已知随机变量 X 具有性质: $\ln X$ 满足一个高斯分布且 $\langle \ln X \rangle = \ln x_0$. 证明:

(a) X 的概率密度的形式为

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{x} \mathrm{e}^{-\frac{[\ln(x/x_0)]^2}{2\sigma^2}}, \quad 0 < x < \infty;$$

(b) $\langle X\rangle = x_0\mathrm{e}^{\sigma^2/2}$, $\langle\ln X\rangle = \ln x_0$;

(c) 这个对数变量的分布能被写作

$$P(x) = \frac{1}{x_0\sqrt{2\pi\sigma^2}}(x/x_0)^{-1-\mu(x)},$$

式中，$\mu(x) = (2\sigma^2)^{-1}\ln(x/x_0)$.

1-3　试证明高斯分布的所有超过二阶的累积等于零，发现具有此特征的更一般的分布.

1-4　泊松分布被定义在离散区域 $n = 0, 1, 2, \cdots$, 表示如下

$$p_n = \frac{a^n}{n!}\mathrm{e}^{-a},$$

求出它的累积量.

1-5　找出对应于特性函数为 $G(k) = \cos ak$ 的分布函数和它的矩.

1-6　计算柯西分布的特性函数，从中如何看出它的某些矩不存在?

1-7　求出如下双变量高斯分布函数的矩和累积

$$P(x, y) = C\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(ax^2+2bxy+cy^2)} \quad (ac - b^2 > 0,\ \ a > 0),$$

这里 C 是一个归一化常数.

1-8　求证前四阶矩和累积之间存在如下的关系:

$$\begin{aligned}
\kappa_1 &= \mu_1,\\
\kappa_2 &= \mu_2 - \mu_1^2 = \sigma^2,\\
\kappa_3 &= \mu_3 - 3\mu_2\mu_1 + 2\mu_1^3,\\
\kappa_4 &= \mu_4 - 4\mu_3\mu_1 - 3\mu_2^2 + 12\mu_2\mu_1^2 - 6\mu_1^4.
\end{aligned}$$

1-9　考虑 $r = 2$ 的情形，如果两个随机变量 x_1, x_2 满足以下三个判据中的一个，那么它们就是统计无关的:

(a) 所有矩可分解为 $\langle x_1^{m_1}x_2^{m_2}\rangle = \langle x_1^{m_1}\rangle\langle x_2^{m_2}\rangle$;

(b) 特性函数可分解为: $G(k_1, k_2) = G_1(k_1)G_2(k_2)$;

(c) 当 m_1 和 m_2 不为零时，累积 $\langle\langle x_1^{m_1}x_2^{m_2}\rangle\rangle$ 等于零.

1-10　试证明维纳 (Wiener) 过程的跃迁概率 $P_{1|1}(y, t|y_0, 0)$ 满足方程 (1.79)，其中 G 为下列核函数给出的算符,

$$G(y, t|y', t') = \frac{\partial}{\partial t}\frac{1}{t}\frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t')}}\exp\left[-\frac{(y-y')^2}{2(t-t')}\right].$$

第 2 章　演化方程

本章导读：借用量子力学的概念，将系统宏观量的演化律归结为“海森伯绘景”和“薛定谔绘景”，前者的微观动力学量随时变化而系统的宏观状态保持固定，后者的时间演化体现在时间有关的分布函数．在马尔可夫过程满足 Chapman-Kolmogotov 方程的统一框架下，对时间有关的动力学系统进行分类，导出描写不同过程的演化方程．列举一些具体的马尔可夫过程．

上章在概率空间研究了随机变量的性质，但还没有涉及它们统计行为的明显时间有关性．为了描写一个物理过程的动力学，人们需要一个随机过程的概念，也就是一个随机变量的统计行为随时间的演化而改变．随机过程推广了确定性时间演化的观念，后者基于一个微分方程，就能描写一些变量的确定性变化，然而在随机过程中，确定性演化将被关于随机变量的时间发展的概率规律所代替．

2.1　从微观动力学到宏观分布函数

在统计动力学中，人们对一个随机变量 $x(t)$ 只能获取的信息是：它在给定时刻 t 取某一可能值的概率有多大？或者平均行为如何？例如，刻画系统涨落行为的二次矩，我们经常碰见的计算方案有两种：$\langle x^2(t)\rangle = N^{-1}\sum\limits_{i=1}^{N} x_i^2(t)$ 或者 $\langle x^2(t)\rangle = \displaystyle\int x^2 P(x,t)\mathrm{d}x$．这两种方法为什么是等价的呢？本节我们借助量子力学中“绘景”的概念给出一个解释．

2.1.1　微观动力系统

$$\frac{\mathrm{d}q_j(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p_j},\quad \frac{\mathrm{d}p_j(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q_j},\quad j=1,2,\cdots,3N. \tag{2.1}$$

现在考虑一个并不明显地依赖于时间的任意动力学函数 $b(q,p)$．在系统运动中，由于坐标和动量变化，那么它的值也将变化，所以我们引入一个函数 $b(q,p;t)\equiv b[q(t),p(t)]$；它的时间依赖性由下列方程确定：

$$\frac{\partial}{\partial t}b(q,p;t) = \sum_{j=1}^{3N}\left(\frac{\partial b}{\partial q_j}\frac{\mathrm{d}q_j}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial b}{\partial p_j}\frac{\mathrm{d}p_j}{\mathrm{d}t}\right) = \sum_{j=1}^{3N}\left(\frac{\partial b}{\partial q_j}\frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial b}{\partial p_j}\frac{\partial H}{\partial q_j}\right), \tag{2.2}$$

在方程 (2.2) 中，我们可以用熟知的泊松括号，那么

$$\frac{\partial}{\partial t}b(q,p;t)=[b,\ H]_P. \tag{2.3}$$

基本动力学量具有特性：$[q_j,p_n]_P=\delta_{j,n}$，$[q_j,q_n]_P=[p_j,p_n]_P=0$. 明显地，当 $b=q_j$ 或 $b=p_j$，方程 (2.3) 退化到方程 (2.1)，所以方程 (2.3) 是演化律的最一般的形式. 有时可以将方程 (2.3) 写成如下有用的形式：

$$\frac{\partial}{\partial t}b(q,p;t)=[H]b(q,p;t), \tag{2.4}$$

式中，算符 $[H]$ 定义为

$$[H]=\sum_{j=1}^{3N}\left\{\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial}{\partial q_j}-\frac{\partial H}{\partial q_j}\frac{\partial}{\partial p_j}\right\}. \tag{2.5}$$

方程 (2.4) 的解能够形式地给出

$$b(t)=\sum_n\frac{1}{n!}t^n b^{(n)}(0)=\sum_n\frac{1}{n!}t^n[H]^n b, \tag{2.6}$$

所以

$$b(t)=\mathrm{e}^{[H]t}b. \tag{2.7}$$

将算符 $\mathrm{e}^{[H]t}$ 作用在初始条件之上，就可得到时刻 t 的动力学函数的值，所以它就是一个传播子且具有李代数结构. 传播子作用在动力学函数上，按下列形式演化：

$$b(q,p;t)=\mathrm{e}^{[H]t}b(q,p;0)=b\left(\mathrm{e}^{[H]t}q,\mathrm{e}^{[H]t}p;0\right)=b[q(t),p(t);0],$$

不过，传播子作用在一个标量上将保持其不变.

2.1.2 海森伯绘景和薛定谔绘景

兹考虑一个包含 N 个点粒子的动力学系统，其被一组位置坐标 $q\equiv(q_1,q_2,\cdots,q_{3N})$ 和对应的动量 $p\equiv(p_1,p_2,\cdots,p_{3N})$ 的哈密顿量所描写. 每个粒子的运动方程可以由 $H(q,p)$ 来产生. 而宏观物理的目标是物理空间的连续函数，即场函数：$B(\{x\},t)$. 在经典力学描述中，对应的微观动力学量 $b(q,p;\{x\},t)$ 为相空间变量的函数，并且总是依赖于参数 $\{x\}$ 和时间 t，注意这两个参数在相空间均是“标量”. 统计力学的任务就是寻找一个连接两个世界的桥梁，具体地说，每个微观动力学函数对应唯一的宏观量：

$$b(q,p;\{x\},t)\longrightarrow B(\{x\},t). \tag{2.8}$$

上式代表了微观相空间到宏观物理空间的一种映射.

1. 海森伯绘景

统计力学的基本思路告诉人们，宏观物理量作为一个可观测量，应等于对应的微观变量的相空间系综平均，写作

$$B(\{x\},t) \equiv \langle b(q,p;\{x\},t)\rangle \equiv \langle b\rangle. \tag{2.9}$$

令 $F(q,p)$ 是一个相空间函数，考虑如下的表示式：

$$B(\{x\},t) \equiv \langle b\rangle = \int \mathrm{d}q\mathrm{d}p b(q,p;\{x\},t)F(q,p), \tag{2.10}$$

这是一个多重积分. 我们现在局限于选择 $F(q,p)$ 具有归一化和非负性，即

$$\int \mathrm{d}q\mathrm{d}p F(q,p) = 1, \quad F(q,p) \geqslant 0. \tag{2.11}$$

满足以上两个特性的相函数 $F(q,p)$ 被称为分布函数. 这里，我们不打算展开讨论分布函数的统计物理意义.

现在，让我们来确定宏观量 $B(\{x\},t)$ 的演化律，它已经对微观动力学量 $b(q,p,\{x\},t)$ 进行了相平均. 我们假设在初始时刻

$$b(q,p;\{x\},0) = b(q,p,\{x\}), \tag{2.12}$$

其中，右端是一个给定的函数. 在 $t=0$，

$$B(\{x\},0) \equiv \int \mathrm{d}q\mathrm{d}p b(q,p;\{x\})F(q,p). \tag{2.13}$$

当微观系统按照哈密顿动力学演化时，在 t 时刻的 $b(q,p;\{x\})$ 成为 $b(q,p;\{x\},t)$，则这个新动力学量的相平均是

$$B(\{x\},t) \equiv \int \mathrm{d}q\mathrm{d}p \left\{\mathrm{e}^{[H]t} b(q,p;\{x\})\right\} F(q,p). \tag{2.14}$$

这个方程给出了在物理空间中宏观量的演化律. 我们借用量子力学中的概念，认为这是一种“海森伯绘景”：在平均过程中，系统的状态保持固定，而动力学量随时间演化.

2. 薛定谔绘景

在海森伯绘景下，为了确定每个时间有关的动力学函数 $b(q,p;\{x\},t)$，进而完成平均，需要去解一个分离的微分方程. 有时这是不方便的. 其实，这个问题可以用另外一种途径得到解决，即对于一个给定的动力系统，去解一个关于分布函数的

偏微分方程，只要这个解是知道的，那么所有动力学函数的相空间平均在任意时刻的演化，就退化为一个简单的积分.

引理: 如果相同的正则变换 $\mathrm{e}^{[G]r}$ 被作用在方程 (2.10) 中积分的两个因子之上，则积分值不变.

我们现在退回到方程 (2.10)，并且应用 $\mathrm{e}^{[H]t}$ 及其逆正则变换到该方程的两个因子之上，这个操作并不改变积分的值，即

$$B(\{x\},t)=\int \mathrm{d}q\mathrm{d}p\left\{\mathrm{e}^{-[H]t}\mathrm{e}^{[H]t}b(q,p;\{x\})\right\}\left\{\mathrm{e}^{[H]t}F(q,p)\right\}, \tag{2.15}$$

在第一个括号内的两个变换相互抵消，以致整个时间有关性被转换到分布函数上. 很自然地定义一个时间有关的分布函数：

$$F(q,p;t)=\mathrm{e}^{[H]t}F(q,p), \tag{2.16}$$

基于这个函数，在时刻 t 的相空间平均定义为

$$B(\{x\},t)=\int \mathrm{d}q\mathrm{d}pb(q,p;\{x\})F(q,p;t). \tag{2.17}$$

在这个新的薛定谔绘景中，时间有关性完全包含在函数 $F(q,p;t)$ 之中. 如果这个单一函数是知道的，那么所有宏观时间有关量的计算正像前面所讲的那样，不必去求解关于每个动力学函数的一个分离的运动方程. 时间有关的分布函数的确定需要去解一个偏微分方程，也就是

$$\partial_t F(q,p;t)=[H(q,p),F(q,p;t)]_P, \tag{2.18}$$

这个方程被称为刘维尔方程，它是经典统计力学的基本方程.

讨论

(1) 刘维尔算子在统计力学中发挥的作用相当于哈密顿在经典力学起到的功效，系演化的产生子，它不是作用在相空间一点上，而是作用在分布函数之上.

(2) 刘维尔方程的解 $F(q,p;t)=F(q(-t),p(-t);0)$，其中，$q(-t)$ 代表在时刻 $-t$ 的位置，如果 q 和 p 代表动力学系统的一组相空间坐标，那么 $q(-t)$ 和 $p(-t)$ 就是 q 和 p 的动力学函数.

(3) 海森伯绘景对应于朗之万方法，薛定谔绘景对应于福克尔–普朗克 (Fokker-Planck) 方法.

2.2 Chapman-Kolmogorov 方程

Chapman-Kolmogorov 方程 马尔可夫过程的分类本质上等价于对 Chapman-Kolmogorov 方程解的分类.

2.2.1　Chapman-Kolmogorov 方程的推导

一个马尔可夫过程被定义为一个具有如下行为的随机过程：对于任何 n 个连续时间组，即 $t_1 < t_2 < \cdots < t_n$，有

$$P_{1|n-1}(y_n, t_n|y_1, t_1; \cdots; y_{n-1}, t_{n-1}) = P_{1|1}(y_n, t_n|y_{n-1}, t_{n-1}). \tag{2.19}$$

$P_{1|1}$ 为跃迁概率.

一个马尔可夫过程完全地被两个函数 $P(y_1, t_1)$ 和 $P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)$ 确定. 整个层级能由它们构造. 例如，考虑 $t_1 < t_2 < t_3$，有

$$\begin{aligned}P_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) &= P_2(y_1, t_1; y_2, t_2)P_{1|2}(y_3, t_3|y_1, t_1; y_2, t_2)\\ &= P_1(y_1, t_1)P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2).\end{aligned} \tag{2.20}$$

连续使用这种算法，我们可以成功地发现所有的 P_n. 这个性质使得马尔可夫过程易于处理，这就是为什么它在实际中非常有用. 任何确定性过程总是一个马尔可夫过程, 最著名的物理上的马尔可夫过程的例子是布朗运动.

现对等式 (2.20) 中的 y_2 积分，对于 $t_1 < t_2 < t_3$，我们获得

$$P_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = P_1(y_1, t_1)\int P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1)P_{1|1}(y_3, t_3|y_2, t_2)\mathrm{d}y_2, \tag{2.21}$$

两边同除以 $P_1(y_1, t_1)$，有

$$T(y_3, t_3|y_1, t_1) = \int \mathrm{d}y_2 T(y_3, t_3|y_2, t_2)T(y_2, t_2|y_1, t_1). \tag{2.22}$$

这个方程被称为 Chapman-Kolmogorov 方程. 它是一个等式，任何马尔可夫过程的跃迁概率必须满足之. 时间编序是必然的：t_2 位于 t_1 和 t_3 之间；当然，若 $\boldsymbol{y}$ 为一个有 f 分量的矢量，这一方程也是成立的，或者 $\boldsymbol{y}$ 仅取离散值，则积分变为求和.

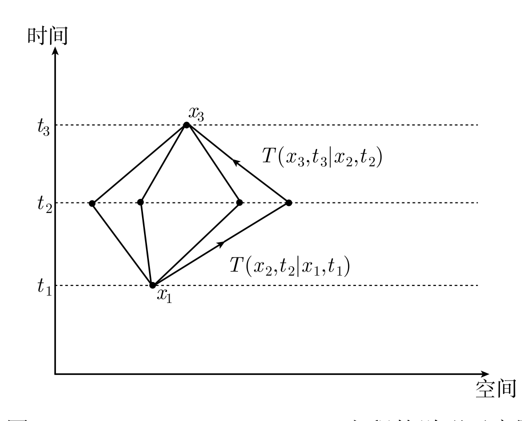


图 2.1　Chapman-Kolmogorov 方程的说明示意图

参考图 2.1，对 Chapman-Kolmogorov 方程的一个简单和直观的解释是：系统欲从时刻 t_1 和点 x_1 出发，在时刻 t_3 到达 x_3；在某一固定时刻 t_2 处于某些态 x_2. 那么从 (x_1, t_1) 到 (x_3, t_3) 的跃迁概率等于 $(x_1, t_1) \longrightarrow (x_2, t_2)$ 和 $(x_2, t_2) \longrightarrow (x_3, t_3)$ 的两跃迁概率的乘积，同时要将所有的可能中间态求和.

注意：一个马尔可夫过程完全地被 P_1 和 $P_{1|1}$ 确定，这是因为整个层级能由它们所构造. 这两个函数不能任意选取，而必须满足两个等式:

(1) Chapman-Kolmogorov 方程；

(2) 明显需要的条件

$$P_1(y_2, t_2) = \int P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) P_1(y_1, t_1) \mathrm{d}y_1. \tag{2.23}$$

反之亦然，即任何两个非负函数 P_1 和 $P_{1|1}$ 满足以上方程，则就唯一地确定了一个马尔可夫过程.

2.2.2 两个简单的马尔可夫过程

扩散过程最显著的例子是漂移等于零 ($g(x, t) = 0$) 的一维扩散过程，同时令 $D = 1$. 这导致高斯传播子

$$T(x, t|x', t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t - t')}} \exp\left[-\frac{(x - x')^2}{2(t - t')}\right], \tag{2.24}$$

显然该过程在时间和空间上是均匀的，它经常被称为标准的*布朗运动过程*. 若我们进一步考虑初始分布密度函数

$$p(x, t = 0) = \delta(x), \tag{2.25}$$

则过程 $X(t)$ 成为著名的*维纳过程*：$X(t) = \int_0^t \xi(t')\mathrm{d}t'$，其中 $\xi(t)$ 是一个白噪声.

另一个重要的例子是将一个常量扩散系数为 D 的布朗运动过程，添加到一个由微分方程 $\mathrm{d}x/\mathrm{d}t = -kx$ ($k > 0$ 为一个常量) 所对应的确定性漂移过程之上，即 $\dot{x}(t) = -kx + \xi(t)$，则传播子为

$$T(x, t|x', t') = \sqrt{\frac{k}{\pi D[1 - \mathrm{e}^{-2k(t-t')}]}} \exp\left\{-\frac{k[x - \mathrm{e}^{-k(t-t')}x']^2}{D[1 - \mathrm{e}^{-2k(t-t')}]}\right\}, \tag{2.26}$$

稳定分布是

$$p(x) = \sqrt{\frac{k}{\pi D}} \exp\left(-\frac{kx^2}{D}\right). \tag{2.27}$$

这被称为奥恩斯坦–乌伦贝克过程.

2.3 微分 Chapman-Kolmogorov 方程

Chapman-Kolmogorov 方程是一个关于条件跃迁概率的积分方程. 为了找到它的解，经常要考虑这个方程所对应的微分形式，即微分 Chapman-Kolmogorov 方程.

假设传播子 $T(x,t|x',t')$ 是时间可微的，对方程 (2.22) 进行时间微分，得到微分 Chapman-Kolmogorov 方程:

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x',t') = A(t)T(x,t|x',t'), \tag{2.28}$$

式中，A 是一个产生无穷小时间平移的线性算符，它通过作用于密度函数 $\rho(x)$ 来定义

$$\begin{aligned} A(t)\rho(x) &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x'[T(x,t+\Delta t|x',t)-\delta(x-x')]\rho(x') \\ &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left[\int \mathrm{d}x' T(x,t+\Delta t|x',t)\rho(x')-\rho(x)\right]. \end{aligned} \tag{2.29}$$

一般情况下算符 A 可能依赖于 t，不过对于一个均匀的马尔可夫过程，传播子 $T(x,t+\Delta t|x',t)$ 在时间间隔 $[t,t+\Delta t]$ 内是与 t 无关的，那么在这种情况下传播子不依赖于时间.

以下几节将引入三种基本的马尔可夫过程，以它们的传播子形式来描写，或者等价地考察它们传播子的短时行为.

2.4 确定性过程和刘维尔方程

马尔可夫过程的一个最简单例子是一个确定性过程，其随机性的唯一来源是初始条件是随机的. 它由某个初始分布密度函数 $p(x,t_0)$ 和一个传播子来确定，后者描写了对应于一个常微分方程的确定性时间变化:

$$\dot{x}(t) = g(x(t)), \tag{2.30}$$

式中，$g(x)$ 为一个关于变量 $x(t)$ 的函数. 为简单起见，设该系统是自发的，即力场 $g(x)$ 不显含时间，那么过程是均匀的.

此常微分方程的相流用 $\varPhi_t(x)$ 表示，其含义为对于固定的 x，相曲线

$$t \longmapsto \varPhi_t(x), \tag{2.31}$$

代表方程的解，其初始值为 $\varPhi_0(x) = x$.

确定性过程的样本轨道由相曲线所给出，那么此过程的传播子写作

$$T(x,t|x',t')=\delta(x-\varPhi_{t-t'}(x')). \tag{2.32}$$

这个方程表示：在系统 t' 时刻位置为 x' 的条件下，过程达到 t 时刻位置 x 处的概率，当且仅当相流在时间间隔 t' 到 t 能从 x' 到 x，也就是充要条件为 $x=\varPhi_{t-t'}(x')$. 易发现它满足 Chapman-Kolmogorov 方程，这就意味着我们已经构造了 Chapman-Kolmogorov 方程的解，从而确定了一个简单的马尔可夫过程.

为了发现确定性过程的无穷小时间平移算符，我们将 (2.32) 式代入 (2.29) 式，有

$$\begin{aligned}A\rho(x)&=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x'\{\delta[x-\varPhi_{\Delta t}(x')]-\delta(x-x')\}\rho(x')\\&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}x'\delta[x-\varPhi_t(x')]\rho(x')=\int \mathrm{d}x' g(x')\left[\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x-x')\right]\rho(x')\\&=-\frac{\partial}{\partial x}[g(x)\rho(x)],\end{aligned} \tag{2.33}$$

故确定性过程的产生算符为

$$A=-\frac{\partial}{\partial x}g(x), \tag{2.34}$$

微分 Chapman-Kolmogorov 方程的形式写作

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x',t')=-\frac{\partial}{\partial x}[g(x)T(x,t|x',t')]. \tag{2.35}$$

这是关于对应于常微分方程 (2.30) 的确定性马尔可夫过程的刘维尔方程. 当然，分布密度函数 $p(x,t)$ 也满足以上方程.

2.5 跳跃过程和主方程

现考虑具有不连续样本路径的过程，其允许真正的概率动力学. 我们需要 $X(t)$ 的样本路径，代替微分方程的光滑解，以完成断续跳跃. 为了用公式表示一个微分 Chapman-Kolmogorov 方程，我们得去构造它的传播子的一个合适短时行为.

为此目的，我们引入跳跃的跃迁速率 $W(x|x',t')$，而 $W(x|x',t')\Delta t$ 等于在无穷小时间间隔 $[t,t+\Delta t]$ 内从态 x' 到态 x 的一个瞬间跳跃的概率密度，这个过程的条件为在时刻 t, 系统的位置是 x'. 给定 $X(t)=x'$，在时刻 t，一个跳跃的总速率为

$$\varGamma(x',t)=\int \mathrm{d}x W(x|x',t), \tag{2.36}$$

它的意义在于：$\varGamma(x',t)\Delta t$ 是过程在时刻 t 完成一个跳跃到其他一些态后而保留在态 x' 的条件概率.

传播子的一个合适短时行为用公式表示为

$$T(x,t+\Delta t|x',t)=W(x|x',t)\Delta t+[1-\Gamma(x',t)\Delta t]\delta(x-x')+O(\Delta t^2), \tag{2.37}$$

等号右端第一项给出了在时间间隔 $[t,t+\Delta t]$ 从 x' 到 x 的跃迁概率；第二项 δ 函数前的因子正好是无跃迁发生概率，即过程在时刻 $t+\Delta t$ 还是在态 x'. 显然，当 $\Delta t\to 0$，传播子趋于一个 δ 函数：$\delta(x-x')$. 从此可知，传播子满足归一化条件.

为了推导跳跃过程的微分 Chapman-Kolmogorov 方程，将 (2.37) 式代入 (2.29) 式，我们发现跳跃过程的产生算符

$$\begin{aligned}A(t)\rho(x)&=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x'[T(x,t+\Delta t|x',t)-\delta(x-x')]\rho(x')\\&=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\int \mathrm{d}x'[W(x|x',t)\Delta t-\Gamma(x',t)\Delta t\delta(x-x')]\rho(x')\\&=\int \mathrm{d}x'W(x|x',t)\rho(x')-\Gamma(x,t)\rho(x)\\&=\int \mathrm{d}x'[W(x|x',t)\rho(x')-W(x'|x,t)\rho(x)].\end{aligned} \tag{2.38}$$

最后一步用到了总跃迁速率的定义. 这直接导致关于传播子的运动方程：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x',t')&=A(t)T(x,t|x',t')\\&=\int \mathrm{d}x''[W(x|x'',t)T(x'',t|x',t')-W(x''|x,t)T(x,t|x',t')],\end{aligned} \tag{2.39}$$

这就是跳跃过程的微分 Chapman-Kolmogorov 方程.

当然，对于概率密度 $p(x,t)$，保持相同方程成立，即

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)&=A(t)p(x,t)\\&=\int \mathrm{d}x'[W(x|x',t')p(x',t)-W(x'|x,t)p(x,t)].\end{aligned} \tag{2.40}$$

这个方程被称之为主方程.

然而必须牢记在心的是，主方程其实是一个关于过程条件跃迁概率的方程，因为一个关于一阶密度函数的时间演化方程并不能足够地去确定一个随机马尔可夫过程.

2.6　扩散过程和福克尔–普朗克方程

迄今已考虑了两种类型的随机马尔可夫过程，它们的样本轨道要么是一个微分方程的解，要么是断续跳跃所带来的不连续路径. 如果对任何 $\varepsilon>0$，以下条件

成立

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-x'|>\varepsilon} \mathrm{d}x T(x, t+\Delta t|x', t) = 0, \tag{2.41}$$

那么，一个马尔可夫过程以概率 1 实现轨道连续. 这个方程意味着当 Δt 趋于零，尺寸大于 ε 的跃迁概率降低的比 Δt 还要快.

当然，确定性过程肯定满足连续条件. 事实上，对于一个确定性过程，我们有

$$\begin{aligned} &\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-x'|>\varepsilon} \mathrm{d}x T(x, t+\Delta t|x', t) \\ &= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-x'|>\varepsilon} \mathrm{d}x \delta[x - \Phi_{\Delta t}(x')] \\ &= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \theta[|x' - \Phi_{\Delta t}(x')| - \varepsilon] = 0, \end{aligned} \tag{2.42}$$

式中, θ 代表单位阶梯函数. 在一个跳跃过程情况下，若允许一些跳跃的尺寸大于 ε，则连续条件被违背，有

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|x-x'|>\varepsilon} \mathrm{d}x T(x, t+\Delta t|x', t) = \int_{|x-x'|>\varepsilon} \mathrm{d}x W(x|x', t) > 0. \tag{2.43}$$

此外，存在着一类深层次的随机马尔可夫过程，它们不是确定性过程，但却满足连续条件. 我们通过研究由主方程描写的跳跃过程的某一极限，来推导一个多变量扩散过程 $X(t) = [X_1(t), X_2(t), \cdots, X_d(t)]$ 的微分 Chapman-Kolmogorov 方程. 为此目的，写出跃迁率

$$W(x|x', t) = f(x', y, t), \tag{2.44}$$

式中，$y = x - x'$，这是一个关于出发点 x'、跳跃增量 y 和时间 t 的函数. 将 (2.44) 式代入主方程 (2.40)，有

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \int \mathrm{d}y f(x-y, y, t) p(x-y, t) - p(x, t) \int \mathrm{d}y f(x, y, t). \tag{2.45}$$

假设 $f(x', y, t)$ 随 x' 光滑地变化，为 y 的一个函数，但在 $y \approx 0$ 附近出现尖锐的峰. 另外，还假定在 f 的宽度尺度范围内，$p(x, t)$ 仅随 x 慢变化. 这使得我们可将项 $f(x-y, y, t)p(x-y, t)$ 展开到 y 的二阶，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = &\int \mathrm{d}y f(x, y, t) p(x, t) - \int \mathrm{d}y y_i \frac{\partial}{\partial x_i} [f(x, y, t) p(x, t)] \\ &+ \int \mathrm{d}y \frac{1}{2} y_i y_j \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} [f(x, y, t) p(x, t)] - p(x, t) \int \mathrm{d}y f(x, y, t). \end{aligned} \tag{2.46}$$

这里相同脚标表求和. 考虑到 $f(x, y, t)$ 强烈地依赖于 y，并不对 y 有关的函数 $f(x-y, y, t)$ 的第二个变数进行展开. 可以看到方程 (2.46) 右边第一项与损失项

(第四项) 相抵消. 引入跳跃分布的第一和第二次矩

$$g_i(x,t) \equiv \int \mathrm{d}y y_i f(x,y,t), \quad D_{ij}(x,t) \equiv \int \mathrm{d}y y_i y_j f(x,y,t), \tag{2.47}$$

最终获得一个扩散过程的微分 Chapman-Kolmogorov 方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x_i}[g_i(x,t)p(x,t)] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}[D_{ij}(x,t)p(x,t)]. \tag{2.48}$$

这就是描写扩散过程的福克尔–普朗克方程，并且扩散过程的传播子也满足这一方程.

一个布朗粒子在势 $U(x)$ 运动，关于坐标和速度的联合分布 $P(x,v,t)$ 满足如下的福克尔–普朗克方程，也称为 Kramers 方程：

$$\frac{\partial P(x,v,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{U'(x)}{m}\frac{\partial P}{\partial v} + \gamma\left[\frac{\partial}{\partial v}(vP) + \frac{k_B T}{m}\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right]. \tag{2.49}$$

Kramers-Moyal 矩展开法　多变量马尔可夫过程的联合概率密度函数 $P(x_1, x_2, \cdots, x_n, t)$ 所遵守的福克尔–普朗克方程形式如下：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(x_1,x_2,\cdots,x_n,t) = &-\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}[A_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)P] \\ &+\sum_{i,j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}[B_{ij}(x_1,x_2,\cdots,x_n)P],\end{aligned}$$

式中，漂移系数 A_i 和扩散系数 B_{ij} 均是实的可微分函数，矩阵 B_{ij} 是对称和正定的，它们的定义如下

$$\begin{aligned}A_i(x_1,x_2,\cdots,x_n) &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\langle[x_i(t+\Delta t)-x_i(t)]\rangle}{\Delta t}, \\ B_{ij}(x_1,x_2,\cdots,x_n) &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\langle[x_i(t+\Delta t)-x_i(t)][x_j(t+\Delta t)-x_j(t)]\rangle}{2\Delta t}.\end{aligned} \tag{2.50}$$

注意: 仅有描写马尔可夫过程的朗之万方程存在对应的福克尔–普朗克方程. 色噪声驱动的动力系统是一个非马尔可夫过程，含记忆阻尼的广义朗之万方程亦描写的是非马尔可夫过程. 这两种情况下，都不能精确地写成关于原变量的福克尔–普朗克方程，需引入辅助变量将原过程扩展成一个马尔可夫流，然后按照 Kremers-Moyal 矩展开方法，来写成关于扩展变量的福克尔–普朗克方程.

例 2.1　将 OU 色噪声 $\varepsilon(t)$ 分别作为外部和内部噪声去驱动一个动力系统，试导出两种情况下的福克尔–普朗克方程.

解: 描写两种系统运动的朗之万方程分别是

$$\text{外部噪声情况：}\quad \dot{x} = f(x) + \varepsilon(t), \tag{2.51}$$

$$\text{内部噪声情况：}\quad m\ddot{x}(t) + \int_0^t \gamma(t-s)\dot{x}(s)\mathrm{d}s + f(x) = \varepsilon(t). \tag{2.52}$$

注意，外部噪声往往是直接加入到控制方程之中；对于内部噪声而言，其与粒子受到的阻尼力来自同一起源，即介质分子对布朗粒子的无规碰撞，它的关联函数与阻尼核函数满足涨落耗散定理：$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(s)\rangle = k_{\mathrm{B}}T\gamma(|t-s|)$. 前者无法从微观角度导出，后者可以写出系统加热库环境的耦合哈密顿量，通过消除环境振子坐标而得出关于系统变量的广义朗之万方程.

(1) 外部噪声情况：将 OU 色噪声的产生方程列于原方程之后，有

$$\dot{x}(t) = f(x) + \varepsilon(t), \quad \dot{\varepsilon}(t) = -\frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\varepsilon + \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\xi(t), \tag{2.53}$$

这里，$\langle\xi(t)\rangle = 0$, $\langle\xi(t)\xi(t')\rangle = 2D\delta(t-t')$. 令 $x_1 = x$，$x_2 = \varepsilon$，我们用随机欧拉算法对方程 (2.53) 进行迭代，即 $x(x+\Delta t) - x(t) = f(x)\Delta t + \varepsilon(t)\Delta t$ 和 $\varepsilon(t+\Delta t) - \varepsilon(t) = -\dfrac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\varepsilon(t)\Delta t + \dfrac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\displaystyle\int_t^{t+\Delta t}\xi(t')\mathrm{d}t'$，则可得诸系数：

$$\begin{aligned}
A_1 &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\langle[x(t+\Delta t) - x(t)]\rangle = f(x) + \varepsilon,\\
A_2 &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\langle[\varepsilon(t+\Delta t) - \varepsilon(t)]\rangle = -\frac{\varepsilon}{\tau_{\mathrm{c}}};\\
B_{11} &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{2\Delta t}\langle[x(t+\Delta t) - x(t)]^2\rangle = 0,\\
B_{12} &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{2\Delta t}\langle[x(t+\Delta t) - x(t)][\varepsilon(t+\Delta t) - \varepsilon(t)]\rangle = 0,\\
B_{22} &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{2\Delta t}\langle[\varepsilon(t+\Delta t) - \varepsilon(t)]^2\rangle = \frac{D}{\tau_{\mathrm{c}}^2}.
\end{aligned} \tag{2.54}$$

所以，关于变量 x 和 ε 的联合概率密度函数 $P(x,\varepsilon,t)$ 满足的福克尔–普朗克方程是

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,\varepsilon,t) = -\frac{\partial}{\partial x}[(f(x)+\varepsilon)P] + \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\frac{\partial}{\partial\varepsilon}(\varepsilon P) + \frac{D}{\tau_{\mathrm{c}}^2}\frac{\partial^2 P}{\partial\varepsilon^2}. \tag{2.55}$$

(2) 内部噪声情况：在方程 (2.52) 中，选 $\gamma(t) = \dfrac{\gamma_0}{\tau_{\mathrm{c}}}\exp(-t/\tau_c)$，这里 γ_0 系马尔可夫摩擦强度：$\displaystyle\int_0^\infty \gamma(t)\mathrm{d}t = \gamma_0$. 令 $z = -\displaystyle\int_0^t \gamma(t-s)v(s)\mathrm{d}s + \varepsilon(t)$，则有

$$\begin{aligned}
\dot{z} &= -\gamma(0)v(t) - \int_0^t \dot{\gamma}_t(t-s)v(s)\mathrm{d}s + \dot{\varepsilon}(t)\\
&= -\frac{\gamma_0}{\tau_{\mathrm{c}}}v(t) - \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\varepsilon + \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\int_0^t \gamma(t-s)v(s)\mathrm{d}s + \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\xi(t)\\
&= -\frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}z - \frac{\gamma_0}{\tau_{\mathrm{c}}}v + \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\xi(t).
\end{aligned}$$

从而，我们将原来的二变量广义朗之万方程变成三变量马尔可夫朗之万方程：

$$\begin{aligned}\dot{x}(t) &= v, \\ m\dot{v}(t) &= f(x) + z(t), \\ \dot{z}(t) &= -\frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}z - \frac{\gamma_0}{\tau_{\mathrm{c}}}v(t) + \frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\xi(t),\end{aligned} \tag{2.56}$$

式中，白噪声的系综平均满足 $\langle\xi(t)\rangle = 0, \langle\xi(t)\xi(t')\rangle = 2\gamma_0 k_{\mathrm{B}}T\delta(t-t')$. 此外，上述变换还有利于数值模拟广义朗之万方程.

故 $P(x,v,z,t)$ 满足的福克尔–普朗克方程是

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(x,v,z,t) = &-\frac{\partial}{\partial x}(vP) - \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v}[(f(x)+z)P] \\ &+\frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\frac{\partial}{\partial z}[(z+\gamma_0 v)P] + \frac{\gamma_0 k_{\mathrm{B}}T}{\tau_{\mathrm{c}}^2}\frac{\partial^2 P}{\partial z^2}.\end{aligned} \tag{2.57}$$

2.7 刘维尔主方程

现在能够引入一类随机过程, 即分段确定性过程，实质上，此过程由一个确定性过程结合一个跳跃过程所构成. 这一过程在自然科学和技术中有各种各样的应用，一些例子可以有严格的数学处理.

一个分段确定性过程的样本轨道包含了光滑的确定性部分，它是某个微分方程的解，然后被不连续跳跃所中断. 基于前几节的结果，我们能容易地写出这个过程传播子的短时行为:

$$T(x,t+\Delta t|x',t) = (1-\varGamma(x')\Delta t)\delta(x-x'-g(x')\Delta t) + W(x|x')\Delta t + O(\Delta t^2), \tag{2.58}$$

式中，δ 函数代表了一个确定性过程的短时行为，它通过对常微分方程进行时间步长取 Δt 的一阶欧拉迭代所给出. δ 函数前的因子中含跳出态 x' 的总跃迁率 $\varGamma(x') = \int \mathrm{d}x W(x|x')$，所以因子 $(1-\varGamma(x')\Delta t)$ 就是在时间间隔 Δt 内不发生跳跃的概率.

方程 (2.58) 右边第二项为时间间隔 Δt 内从 x' 到 x 的跳跃概率. 为简单起见，我们仅考虑过程在时间上是均匀的，而推广到非均匀情况也是可行的.

由于以上的短时行为，我们直接写出一个关于分段确定性过程传播子的微分 Chapman-Kolmogorov 方程:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}T(x,t|x',t') = &-\frac{\partial}{\partial x}[g(x)T(x,t|x',t')] \\ &+\int \mathrm{d}x''[W(x|x'')T(x'',t|x',t') - W(x''|x)T(x,t|x',t')].\end{aligned} \tag{2.59}$$

右边第一项描写了确定性漂移，而第二部分描写了以速率 $W(x'|t')$ 从 x' 到 x 的跳跃. 人们通常称方程 (2.59) 为刘维尔主方程.

2.8 一些具体的马尔可夫过程

下列的十个典型的马尔可夫过程是对一些物理过程的分类和复杂模型的基础.

1. 维纳过程

对于 $-\infty < y < \infty$，当 $t_2 > t_1$，设某一过程的跃迁概率满足 Chapman-Kolmogorov 方程：

$$P_{1|1}(y_2, t_2|y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp\left[-\frac{(y_2 - y_1)^2}{2(t_2 - t_1)}\right]. \tag{2.60}$$

选择 $P_1(y, 0) = \delta(y)$，这是一个非稳定马尔可夫过程，称为维纳过程. 通常考虑 $t > 0$ 的情形，它描写了一个布朗粒子位置的随机行为. 按照 Chapman-Kolmogorov 方程，t 时刻在 y 处发现粒子的概率密度为

$$P_1(y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left(-\frac{y^2}{2t}\right). \tag{2.61}$$

2. 泊松过程

当 $t > 0$ 时，$Y(t)$ 仅具有 $n = 0, 1, 2, \cdots$ 的值，定义一个马尔可夫过程 ($t_2 \geqslant t_1 \geqslant 0$)

$$P_{1|1}(n_2, t_2|n_1, t_1) = \frac{(t_2 - t_1)^{n_2 - n_1}}{(n_2 - n_1)!} \mathrm{e}^{-(t_2 - t_1)}, \quad P_1(n, 0) = \delta_{n,0}. \tag{2.62}$$

注意：若$n_2 < n_1$，则 $P_{1|1} = 0$. 因而，每一样本函数 $y(t)$ 是一个在随机时刻一次成功的单位长度的跳跃. 它在时间点上被唯一地确定，在此时刻跳跃发生. 这些时间点包含时间轴上的一个随机点组，它们在任何两个时间 t_1, t_2 之间的数目遵守泊松分布 (2.62) 式. 所以，$Y(t)$ 被称为泊松过程. 它的表述为：N 个独立随机点落入一个给定区域的概率为

$$p_N = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} \mathrm{e}^{-\langle N \rangle}, \tag{2.63}$$

显然，其满足归一化要求，因为 $\sum\limits_{N=0}^{\infty} \frac{\langle N \rangle^N}{N!} = \mathrm{e}^{\langle N \rangle}$.

以下为泊松分布的不同表示方式.

(1) 泊松分布可以定义在离散区域 $n = 0, 1, 2, \cdots$：$p_n = \frac{a^n}{n!} \mathrm{e}^{-a}$，其中, a 为一

个正数，见图 2.2. 例如, 在与一个大热库 ($V_2 \to \infty$，$N \to \infty$，但 $N/V_2 = \rho =$ 常量) 连通的一个小体积 (V_1) 内的分子数就满足泊松分布，这里 $a = \rho V_1$.

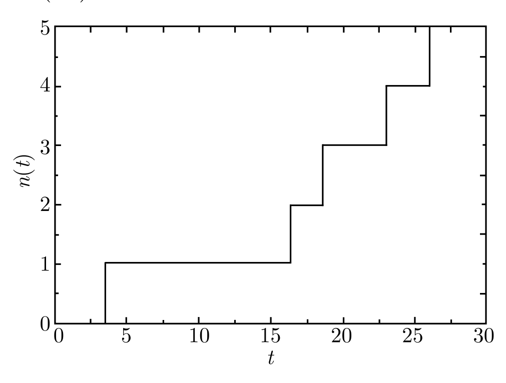


图 2.2　泊松过程的样本轨道

(2) 该分布是如下主方程的解：

$$\dot{W}(m,t) = \mu W(m-1,t) - \mu W(m,t), \tag{2.64}$$

式中，m 是离散随机变量，可取 $m = 1, 2, \cdots, M$，μ 是两临近态之间的跃迁概率. 那么方程 (2.64) 右端的第一项代表 $m-1$ 态向当前态 m 跃迁的粒子数，第二项代表当前态 m 向 $m+1$ 态跃迁的粒子数. 初始条件是

$$W(m,0) = \delta_{m,0}, \tag{2.65}$$

方程 (2.64) 的解为如下的泊松分布:

$$W(m,t) = \frac{\tau^m}{m!}\mathrm{e}^{-\tau}, \quad \tau = \mu t. \tag{2.66}$$

泊松分布的所有累积 κ_n 是相等的，$\kappa_n = \tau$ ($n \geqslant 1$).

物理上，泊松分布一般描述了在一个有限区域内发现独立事件数目的概率分布，例如，在一个给定的期间，雨滴落入一个给定的瓦片的数目，其被一个单参数所确定，即平均数.

3. Ornstein-Uhlenbeck 过程

最著名的稳定马尔可夫过程的例子是 Ornstein-Uhlenbeck 过程①，定义为

$$P_1(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}, \tag{2.67}$$

$$T_\tau(y_2|y_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-\mathrm{e}^{-2\tau})}}\exp\left[-\frac{(y_2 - y_1\mathrm{e}^{-\tau})^2}{2(1-\mathrm{e}^{-2\tau})}\right]. \tag{2.68}$$

①Uhlenbeck G E, Ornstein L S. Phys Rev, 1930, 36: 823.

这个过程起源于为了描述一个布朗粒子速度的随机行为. 显然，它有零平均和自关联函数：$k(\tau) = \mathrm{e}^{-\tau}$.

Ornstein-Uhlenbeck 过程是稳定的、高斯和马尔可夫的. 其实，仅这一个过程具有如此三个性质，反之亦然. 这个表述称为Doob 定理[①]. 已在例 1.5 给出了证明.

4. 柯西过程

下面的跃迁概率满足 Chapman-Kolmogrov 方程，

$$T_\tau(y_2|y_1) = \frac{1}{\pi}\frac{\tau}{(y_2-y_1)^2+\tau^2} \quad (-\infty < y_1, y_2 < \infty, \quad \tau > 0).$$

这个马尔可夫过程称为柯西过程.

5. 独立增量过程

一个马尔可夫过程 $z(t)$，它的跃迁概率具有以下形式

$$T_\tau(z_2|z_1) = T_\tau(z_2 - z_1),$$

称为独立增量过程，它是均匀的但不稳定. 为了保证 Chapman-Kolmogrov 方程能被满足，需要

$$\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} T_\tau(z)\mathrm{d}z = \mathrm{e}^{\tau\Psi(k)},$$

式中，$\Psi(k)$ 满足 $\Psi(0) = 0$. 可证当 $t \to \infty$，该过程的渐进分布 $P_1(z, t \to \infty)$ 为一高斯函数.

6. 均匀过程

令一个稳定马尔可夫过程 $Y(t)$ 由 $P_1(y_1)$ 和 $T_\tau(y_2|y_1)$ 确定. 考虑一个确定时间 t_0，$Y(t_0)$ 的值按照一个概率 $p(y_0)$ 而分布. 现在定义一个新的、非稳定马尔可夫过程 $Y^*(t)$，当 $t \geqslant t_0$ 时，有

$$P_1^*(y_1, t_1) = \int T_{t_1-t_0}(y_1|y_0)p(y_0)\mathrm{d}y_0, \tag{2.69}$$

$$P_{1|1}^*(y_2, t_2|y_1, t_1) = T_{t_2-t_1}(y_2|y_1). \tag{2.70}$$

这个过程是非稳定的，因为前提是挑选了一个一定的时间 t_0. 然而，它的跃迁概率仅与时间间隔有关，这点与真正的稳定马尔可夫过程是一致的. 跃迁概率仅依靠时间差的非稳定马尔可夫过程被称为均匀过程. 这一过程通常出现在稳定的马尔可夫过程的子系综. 维纳过程就是一个均匀过程的例子，但它不能归类于稳定的马尔可夫过程.

①Doob J L. Annals of Math, 1942, 43: 351.

7. 随机电报过程

令 Y 的取值为 ±1，那么

$$P_{1|1}(y,t|y',t')=\frac{1}{2}[1+\mathrm{e}^{-2\gamma(t-t')}]\delta_{y,y'}+\frac{1}{2}[1-\mathrm{e}^{-2\gamma(t-t')}]\delta_{y,-y'},$$

满足 Chapman-Kolmogrov 方程，并且与 $P_1(y,t)=\dfrac{1}{2}(\delta_{y,1}+\delta_{y,-1})$ 一致. 如此定义的马尔可夫过程是一个二分或两值马尔可夫过程，也被称为随机电报过程.

8. 分支过程

考虑一个细胞分裂成两个细胞的问题，见图 2.3. 一个年龄为 τ 的细胞以一个概率 $\gamma(\tau)\mathrm{d}\tau$ 在下一个 $\mathrm{d}\tau$ 时间间隔内分裂为两个细胞，然后它们中的任一个再从族树的一个分支出发. 问题是如何确定从零时刻有 m 分支的系统在 t 时刻有 n 个分支的概率? 当然，这个模型能转化为包括一个死亡概率. 如果人们考虑引起多于两个粒子的概率，那么就可应用到宇宙射线瀑布和反应堆的中子等问题. 不过，在这两种情况下，若 γ 不依靠年龄，则使得问题马尔可夫化.

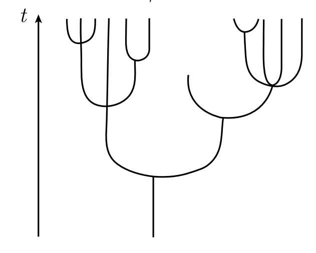


图 2.3　分支过程的示意图

定义一个分支过程的特征：① 每个个体均启动了一族后代；② 所有家族具有相同的随机性质；③ 它们不与另外的族发生相互作用. 作为③的一个结果，条件概率 $P(n,t|m,0)$ 是 m 个因子 $P(n,t|1,0)$ 的卷积. 这给出从 $t=0$ 时刻 m 个体出发的一个分支过程概率产生函数的第一个等式:

$$F(z,t|m,0)=[F(z,t|1,0)]^m \quad (t>0). \tag{2.71}$$

这足以用其去研究一个个体的后代.

一个年龄为 τ 的细胞在下一时间间隔 $\mathrm{d}\tau$ 分裂的概率为 $\gamma(\tau)\mathrm{d}\tau$. 设某一细胞在 $t=0$ 诞生，令 $w(\tau)$ 是一个细胞达到年龄 τ 而没有分裂的概率密度，于是，$w(0)=1$ 且

$$\mathrm{d}w(\tau)=-\gamma(\tau)w(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{2.72}$$

从而 $w(\tau)$ 被 $\gamma(\tau)$ 唯一地确定为

$$w(\tau)=\exp\left[-\int_0^\tau \gamma(t')\mathrm{d}t'\right]. \tag{2.73}$$

显然，一个单细胞在时刻 t 存在的概率密度就是 $w(t)$. 细胞在年龄 τ 和 $\tau+\mathrm{d}\tau$ 之间分裂的概率是 $-\mathrm{d}w(\tau)$，即由方程 (2.72) 所给出. 若总体中包含两个新诞生的细

胞，则每个细胞是从它自己家族分支出发的. 那么，从时刻 $t=0$ 出发的一个单细胞，在 t 时刻有 n 个细胞的概率为

$$P(n,t|1,0)=\delta_{n,1}w(t)-\int_0^t \mathrm{d}w(\tau)P(n,t|2,\tau), \tag{2.74}$$

这是分支过程的第二个等式.

对这个等式乘以 z^n，并对 $n=1,2,3,\cdots$ 求和，有

$$F(z,t|1,0)=zw(t)-\int_0^t \mathrm{d}w(\tau)F(z,t|2,\tau), \tag{2.75}$$

考虑到时间上的均匀性，有

$$F(z,t|2,\tau)=F(z,t-\tau|2,0)=[F(z,t-\tau|1,0)]^2, \tag{2.76}$$

将上式代入方程 (2.75)，经过重新整理一些项，有

$$\begin{aligned}F(z,t|1,0)-z&=-\int_0^t \mathrm{d}w(\tau)\{[F(z,t-\tau|1,0)]^2-z\}\\&=-\int_0^t w'(t-t')\{[F(z,t'|1,0)]^2-z\}\mathrm{d}t'.\end{aligned} \tag{2.77}$$

这是一个关于 $F(z,t|1,0)$ 的方程，只要知道 $\gamma(\tau)$，就确定了概率产生函数以及分布. 处理分支过程退化为去求解一个非线性积分方程.

9. 衰变过程

考虑一块在 $t=0$ 时含有 n_0 个活性核的放射性物质，在 t 时刻 $(t>0)$，激活核的数目 $N(t)$ 是一个非稳定随机过程. 它是马尔可夫的，因为对于 $t_2>t_1$，$N(t_2)$ 的概率分布形式是在条件 $N(t_1)=n_1$ 之下，而与以前的历史无关.

该过程被简化为单个核的互相独立衰变过程的组合. 令 w 为一个核子在时刻 t_1 时的残余概率，那么残余 n_1 个核的概率是

$$P_1(n_1,t_1)=\begin{pmatrix}n_0\\n_1\end{pmatrix}w^{n_1}(1-w)^{n_0-n_1}, \tag{2.78}$$

式中，

$$\begin{pmatrix}n_0\\n_1\end{pmatrix}=\frac{n_0(n_0-1)(n_0-2)\cdots(n_0-n_1+1)}{n_1!} \tag{2.79}$$

是通常二项式系数的记号. 注意：当 $n_1<0$ 或 $n_1>n_0$，只要人们将二项式系数取为零，那么这个公式就对所有的 n_1 整数值成立. 从这个公式，用经典概率论中的

标准计算可以推导出

$$\begin{aligned}\langle N(t_1)\rangle &= \left[\sum_{n_1} n_1 \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \end{pmatrix} w^{n_1} v^{n_0-n_1}\right]_{v=1-w} \\ &= \left[w\frac{\partial}{\partial w}(w+v)^{n_0}\right]_{v=1-w} \\ &= wn_0. \end{aligned} \tag{2.80}$$

接下来计算残余的可能性 $w = w(t_1)$. 现知道一个残余核每单位时间衰变的概率为一常量 γ，则

$$w(t) = \mathrm{e}^{-\gamma t}, \tag{2.81}$$

将 (2.81) 式代入方程 (2.78)，得到时间有关的 P_1:

$$P_1(n_1, t_1) = \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\gamma t_1 n_1}(1-\mathrm{e}^{-\gamma t_1})^{n_0-n_1}. \tag{2.82}$$

用相同的公式写出 $t_2 > t_1$ 的跃迁概率表示式:

$$P_{1|1}(n_2, t_2|n_1, t_1) = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \end{pmatrix} \mathrm{e}^{-\gamma(t_2-t_1)n_2}[1-\mathrm{e}^{-\gamma(t_2-t_1)}]^{n_1-n_2}. \tag{2.83}$$

以上两个方程联合起来，完全确定了衰变的马尔可夫过程.

10. 袋鼠 (Kangaroo) 过程

若一个马尔可夫过程的跃迁矩阵可分解为：$W(y|y') = u(y)v(y')$ $(y \neq y')$，则这个过程称之为“袋鼠”过程. 描写此过程的主方程可解，即 $P(y,t)$ 通过一个积分能用 $P(y,0)$ 表示. 其思路是：导出一个积分方程 $\sigma(t) = \int v(y)P(y,t)\mathrm{d}y$，然后在拉普拉斯空间求解它.

进一步，在袋鼠过程中，如果 $v(y) =$ 常数，则被称为 Kubo-Anderson 过程. 事实上，随机电报过程就是这样一个特殊情况.

习 题

2-1 联合变量 y 和 ξ 遵守以下方程:

$$\dot{y} = -y + \xi, \quad \dot{\xi} = -\gamma\xi + L(t),$$

式中，$L(t)$ 是高斯白噪声，满足 $\langle L(t)\rangle = 0$ 和 $\langle L(t)L(t')\rangle = 2\delta(t-t')$. 当初始条件

为 $\delta(y-y_0)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)/\sqrt{2\pi}$，证明关于单独变量 y 的边缘分布满足

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial y}yP+\frac{1-\mathrm{e}^{-(1+\gamma)t}}{1+\gamma}\frac{\partial^2 P}{\partial y^2}.$$

2-2　一个马尔可夫过程 $z(t)$，它的跃迁概率具有以下形式:

$$T_\tau(z_2|z_1)=T_\tau(z_2-z_1),$$

被称为独立增量过程，它是均匀的但不稳定. 为了保证 Chapman-Kolmogrov 方程成立，则需要

$$\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}T_\tau(z)\mathrm{d}z=\mathrm{e}^{\tau\Psi(k)},$$

式中，$\Psi(k)$ 是具有 $\Psi(0)=0$ 性质的关于 k 的某些函数. 试证明当 $t\to\infty$，$P_1(z,t)$ 成为高斯分布.

2-3　证明 (2.68) 式满足方程:

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial\tau}&=\frac{\partial}{\partial y_2}y_2T+\frac{\partial^2T}{\partial y_2^2},\\ \frac{\partial T}{\partial\tau}&=-y_1\frac{\partial}{\partial y_1}T+\frac{\partial^2T}{\partial y_1^2},\end{aligned}$$

这两个是著名的 Ornstein-Uhlenbeck 过程的朝前和朝后的 Kolmogorov 方程.

2-4　对于维纳过程，当 $0<t_1<t_2$，求证:

$$\begin{aligned}\langle y_2\rangle_{y_1}=y_1,\quad \langle\langle y_2^2\rangle\rangle=t_2-t_1;\\ \langle y_1\rangle_{y_2}=\frac{t_1}{t_2}y_2,\quad \langle\langle y_1^2\rangle\rangle=\frac{t_1}{t_2}(t_2-t_1),\end{aligned}\tag{2.84}$$

式中，y_1,y_2 代表 $Y(t_1),Y(t_2)$，符号 $\langle\ \rangle_z$ 代表具有常量 z 的条件平均.

2-5　$Y(t)$ 是一个 OU 过程，定义 $Z(t)=\int_0^t Y(t')\mathrm{d}t'$. 过程 $Z(t)$ 是高斯的，但既不是稳定的，也不是马尔可夫的.

(a) 求证:

$$\langle Z(t_1)Z(t_2)\rangle=\mathrm{e}^{-t_1}+\mathrm{e}^{-t_2}-1-\mathrm{e}^{-|t_1-t_2|}+2\min(t_1,t_2);$$

(b) 找出 $Z(t)$ 的特性函数，并用之证明:

$$\langle\cos[Z(t_1)-Z(t_2)]\rangle=\exp[-\mathrm{e}^{-|t_1-t_2|}+1+|t_1-t_2|].$$

2-6　定义一个随机过程: $Y(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}at+\phi}$, 其中, a 为固定值, ϕ 是一个随机角, 在 $0 \leqslant \phi < 2\pi$ 均匀地分布, $P_1(\phi) = 1/2\pi$, 求证 $Y(t)$ 的谱密度为洛伦兹形式.

2-7　考虑一个过阻尼谐振子的朗之万方程

$$\dot{x}(t) = -\gamma x(t) + h(t) + \xi(t),$$

式中, $h(t)$ 是一个外部力, $\xi(t)$ 是一个高斯白噪声, $\langle \xi(t) \rangle = 0$, $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\gamma k_{\mathrm{B}} T \delta(t - t')$, 计算:

(a) 关联函数

$$C(t, t') = \langle x(t)x(t') \rangle_{h=0},$$

(b) 响应函数

$$\chi(t, t') = \frac{\delta \langle x(t) \rangle}{\delta h(t')},$$

以及该函数的傅里叶变换.

第3章　反常扩散现象

本章导读：介绍多种反常扩散现象及诱发的机制，主要是问题本身的动力学而不是事先的假设所产生，特别是复杂结构和几何因素. 寻找产生大涨落或强关联的可能原因，并给出统计分析.

人们对布朗运动的认识可以追溯到 1785 年 Ingenhausz 观测到木炭粉末在酒表面的运动，Brown 在 1828 年发现花粉颗粒在水面作不间断的无规则运动. 1905 年，Einstein 在一篇开创性的文章中，建立了布朗运动的扩散理论. Einstein 指出布朗运动可以看成很多个相同粒子在相同条件下组成的“系综”随时间的扩散，并得出自由粒子的方均位移与时间成线性关系：$\langle x^2(t)\rangle = 2Dt$，其中 D 为扩散系数.

近年来，随着实验技术的不断进步，人们在湍流、渗透中的核磁共振、多孔介质的渗透、有缺陷的非晶格半导体中的带电粒子、固体表面、细胞中单元结构的形成、生长表面等系统中，都观察到偏离布朗运动特性的扩散行为：自由粒子均方位移在长时间后正比于时间的分数次幂，即 $\langle x^2(t)\rangle \sim t^\alpha$(这里 α 称为反常扩散指数)，其中 $0<\alpha<1$ 为欠扩散，$\alpha=1$ 为正常扩散，$1<\alpha<2$ 为超扩散，$\alpha=2$ 为弹道扩散. 图 3.1 绘出了正常 ($\alpha=1.0$) 和超扩散 ($\alpha=1.5$) 布朗粒子的二维轨迹.

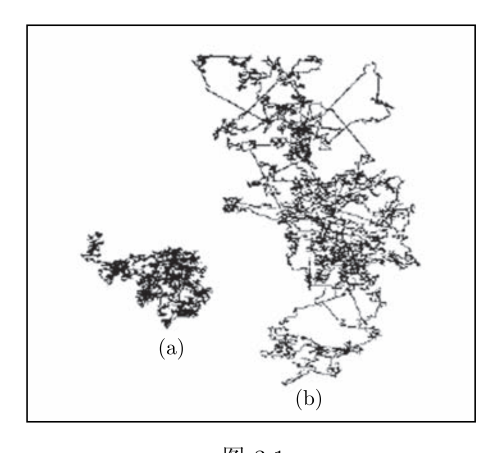


图 3.1

(a) 正常布朗运动；(b) 超扩散布朗运动

异常材料的局域输运系数和驱动场是高度复杂和不规则的，大部分模型是按一定概率分布随机地选择局域量. 淬火破缺意味着随机量不随时间演变，这经常用

来描写杂质、缺陷和无组织系统的动力学行为. 本章所涉及的模型是在欧几里得晶格上的无规行走，其具有从 m 态到 n 态的非均匀跃迁率 W_{nm}，在时间尺度上破缺系统的演化是慢的，人们感兴趣的是在淬火环境中，无规行走者的特性. 我们试图阐述一个主要的想法：常规中心极限定理和扩散指数的“平均场”值被破坏，要么是由于非常大的涨落 (宽分布)，要么是长程关联. 当统计反常是因为问题本身的动力学而不是事先的假设所诱导，那么将会呈现非常有趣的现象，特别是在几何上如何诱发反常扩散. 所以，我们应该寻找产生大涨落或强关联的可能机制. 一旦那些机制被明确了，那么所研究问题的输运行为就能简单地讨论.

当然，更加精确的描述需要一些专门的技术，描述这一现象的物理模型和数学方程有：连续时间无规行走 (CTRW)、莱维 (Lévy) 飞行、含非欧姆 (Ohmic) 记忆阻尼的广义朗之万方程、分数阶朗之万方程、分数阶福克尔–普朗克方程等. 本质上反常扩散源于时间和空间上的非局域性.

3.1　宽分布导致超扩散

我们在第 1 章已经讨论了宽分布的广义中心极限定理，本章主要介绍它的应用，这将导致超扩散.

3.1.1　莱维飞行和物理应用

若 l_n 代表粒子在时间步 $t = n\tau$ 所成功完成的跳跃长度，则 $X_N = \sum_{n=1}^{N} l_n$ 就给出了一种布朗运动的自然推广. 随着时间的演化，可能会有越来越长的跳跃事件发生，见图 3.2(a). 因为行走者所占用的容量与跳跃的步数有关，即 $R^{d_f} = N$，所以一个莱维飞行有一个分形维. 这一运动形式的应用主要在于宽分布 $p(l)$.

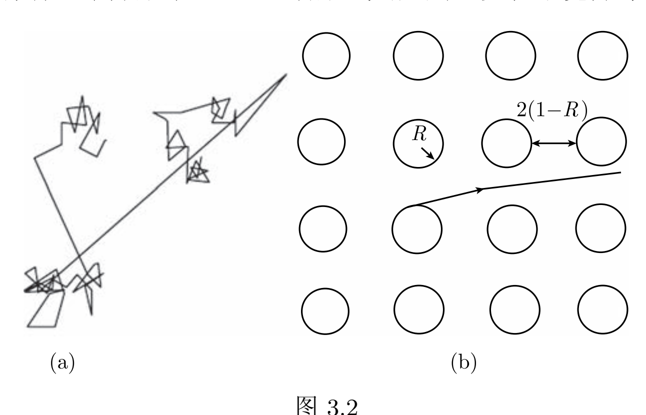


图 3.2

(a) 一个典型的莱维飞行；(b) 一个经典粒子被圆圈反射而在缝隙中行走

3.1.2 洛伦兹气体中几何诱发反常扩散

让我们考虑一个洛伦兹气体，如图 3.2(b) 所示，其中一个粒子被中心在超立方体晶格节点的球形障碍物反射. 自由粒子能够自由移动而没有碰撞，那里就存在任意长的路径. 那些路径长度的分布建立在一个简单的几何基础之上，

$$p(l) \sim (1-R)/l^3, \quad l \to \infty, \tag{3.1}$$

式中，R 是球的半径，晶格间距被归一化到 2($R=1$ 球互相接触). 在这个弹子上的扩散以致能被一个临界值 $\mu=2$ 的莱维飞行所模型，这导致一个典型的时间有关的方均位移：$X_t^2 \sim t\ln t$. 经过莱维飞行分析知，这个问题的扩散前沿仍保持高斯特点.

其实，对于很小的障碍物 ($R \to 0$)，分布式 (3.1) 仅应用于很长的路径 $l \gg l^*$，而 $l^* \sim R^{-1}$. 对于较短的路径，有

$$p(l) \sim l^{-5/2}, \quad l \leqslant l^*. \tag{3.2}$$

在暂态区，$t \leqslant t_{\mathrm{c}} \sim R^{-3/2}$，有 $X_t^2 \sim t^{4/3}$；在渐进区，$X_t^2 \sim t\ln t$ 被达到.

如果晶格结构变化，例如，换成具有足够大的三角形障碍物，那些长碰撞轨道不再存在 (水平线成为有限). 这种情况下，扩散为正常. 不过应注意如果弹子具有有限的水平线，扩散仍然是反常的，这是由于成功跳跃之间存在复杂的长程关联.

3.1.3 聚合物吸附和自消除莱维飞行

一个聚合物的一些点直接与一个吸引墙相接触，这些点被一个大的回线所分开. 主要观点是这些回线尺寸的分布按照一个幂律衰减，则诱发一个连贯两个吸附单体之间的距离的宽分布. 换句话说，链的型态在墙上的投影是一个自消除莱维飞行 (两个吸附单体不能占据相同的地点). 如果仅因为墙而吸附链节点，那么步长度分布写作

$$p(l) \sim l^{-(1+\mu)}, \tag{3.3}$$

式中，$l \leqslant N^\nu, \mu=\phi/\nu$，$\nu$ 为表征一个非吸附链节点到端点的距离的指数 ($R \sim N^\nu$)，ϕ 是跨越指数，即确定吸附单体的数目：N^ϕ.

一个自消除莱维飞行 (SALF) 存在一个平面 (μ, d) 的相图，其中 d 是墙的维数. 扩散指数 ν_{SALF} 由弗洛里 (Flory)① 理论计算. 只要链在阈值还是各向同性的，人们就有自洽关系:

$$R_{||} \sim N^\nu \sim (N^\phi)^{\nu_{\mathrm{SALF}}}, \tag{3.4}$$

① 保罗 约翰 弗洛里：Paul John Flory(1910~1985) 美国化学家，因发展了研究长链分子的方法而获 1974 年诺贝尔化学奖.

导致 $\nu_{\mathrm{SALF}} = \nu/\phi = 1/\mu$. ϕ 的上界在三维 $(3 = d + 1)$ 下写作

$$\phi \leqslant \nu. \tag{3.5}$$

3.2 长等待时间诱发欠扩散

3.2.1 晶格上的无规行走

在这一节中，我们考虑一个在规则晶格上的无规行走，如图 3.3 所示. 粒子在完成下一次跳跃之前需要在一个态停留一段时间 τ. 这个等待时间是一个与每个新跳跃无关的随机变量，其分布为 $\psi(\tau)$. 为简单起见，τ 与跳跃长度 l 无关，后者按照 $p(l)$ 分布. 人们能将这个问题处理成沿着陷阱的扩散，但是一个给定的逗留时间并不对应于一个给定的态，而是在改变每一个新访问地点的逗留时间. 在这个模型中，破缺是以一种"退火"方式通过 $\psi(\tau)$ 引入的. 对应的"淬火"问题是指每个态皆有一个俘获时间，研究它的手段称为连续时间无规行走. 对于任意 $\psi(\tau)$ 的连续时间行走理论已经被许多作者研究了，一些物理量能用生成函数方法计算得到. 这里，我们不用演化或动力学方程，而是用简单的统计分析，定性和半定量地考察当 $\psi(\tau)$ 是一个宽分布时，粒子呈现欠扩散行为.

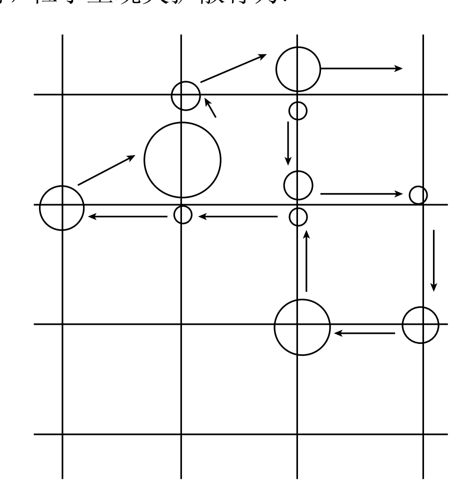


图 3.3 一个连续时间行走者在晶格中跳跃和等待的示意图

扩散行为 令 N 是行走者在 t 时间期间所完成跳跃的步数；则它的位置的 α 分量的平方平均等于

$$\overline{X_\alpha^2} = \langle l_\alpha^2 \rangle N \quad (N \to \infty), \tag{3.6}$$

式中，$\langle l_\alpha^2 \rangle$ 是一次跳跃的平方平均长度，计算为

$$\langle l_\alpha^2\rangle = \int l_\alpha^2 p(l)\mathrm{d}^d l. \tag{3.7}$$

式中，上标“d”代表维数. 总的时间 t 简单等于 N 次态等待时间之和

$$t = \sum_{n=1}^{N} \tau_n, \tag{3.8}$$

这是 N 个独立随机变量的和. 分以下两种情况来讨论.

(1) 若 $\langle\tau\rangle$ 为有限的，则 t 的典型行为是 $t \sim N\langle\tau\rangle$，以致于扩散在长时间后为

$$\overline{X_\alpha^2} = 2D_{\alpha\alpha}t, \quad D_{\alpha\alpha} = \langle l_\alpha^2\rangle/2\langle\tau\rangle. \tag{3.9}$$

与通常的扩散公式相比较，我们可以发现扩散常数与选规则的分离时间 $t = n\langle\tau\rangle$ 时有相同的值，或者说，平均来讲成功的跳跃是以常量速率 τ^{-1} 发生的.

(2) 若 $\psi(\tau)$ 是一个宽分布，比如

$$\psi(\tau) \simeq \tau_0^\mu \tau^{-(1+\mu)} \quad (\tau \to \infty), \tag{3.10}$$

式中，$0 < \mu \leqslant 1$，以致于 $\langle\tau\rangle = +\infty$，则 t 的行为是

$$t \sim \tau_0 N^{1/\mu}, \tag{3.11}$$

这导致欠扩散：

$$\overline{X_\alpha^2} \sim \begin{cases} \langle l_\alpha^2\rangle \left(\dfrac{t}{\tau_0}\right)^\mu & (0 < \mu < 1), \\ \langle l_\alpha^2\rangle \dfrac{t}{\tau_0 \ln(t/\tau_0)} & (\mu = 1). \end{cases} \tag{3.12}$$

注意：如果 ψ 具有 (3.10) 式 $(1 < \mu < 2)$ 的分布，那么将导致对正常扩散行为的反常修正，也就是

$$\overline{X_\alpha^2} \sim \begin{cases} 2D_{\alpha\alpha}t + ct^{1/\mu} & (1 < \mu < 2), \\ 2D_{\alpha\alpha}t + ct/\ln t & (\mu = 2). \end{cases} \tag{3.13}$$

当 $\mu > 2$，$\overline{X_\alpha^2} = (\langle l_\alpha^2\rangle/\langle\tau\rangle)t + ct^{1/2}$.

3.2.2 梳状结构中的扩散

梳状的齿条扮演着陷阱的角色，粒子沿着 X 轴继续进行随机运动前，将在那里停留一段时间，见图 3.4. 那么，对于无穷深的齿条 $(L = +\infty)$，等待时间分布

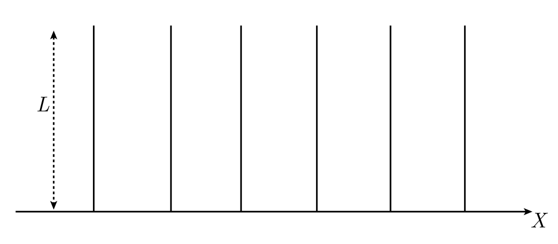


图 3.4 梳状结构

$\psi(\tau)$ 就简单为一个一维布朗运动在原点 (齿条的入口) 的首次返回时间. 对于大 τ，它按照下式的规律衰变：

$$\psi(\tau) = P_1(\tau) \sim \tau^{-3/2}. \tag{3.14}$$

从而，沿着 X 的运动能被描写成一个具有 $\mu = \dfrac{1}{2}$ 的连续时间无规行走，梳状几何诱发的反常扩散为

$$\overline{X^2} \sim t^{1/2}. \tag{3.15}$$

现在考虑一个有限深 L 的齿条情况. 探测一给定齿阱所需的时间的量级为 $\tau_{\rm c} \sim L^2/D_0$，这里 D_0 是沿着每个齿的裸扩散系数. 若 $\tau \gg \tau_{\rm c}$，$P_1(\tau)$ 的指数衰变被恢复，则花费在一个齿阱内的平均时间等于

$$\langle \tau \rangle \sim \int^{\tau_{\rm c}} \tau {\rm d}\tau \tau^{-3/2} \sim L. \tag{3.16}$$

所以，当 $t \gg \tau_{\rm c}$，呈现正常扩散，其扩散系数依赖于 L，$D \sim 1/L$.

3.2.3 间歇动力系统中的反常扩散

众所周知，纯粹的确定性动力系统也能产生扩散运动，这是它们动力学混沌特性的结果. 一个非常简单的例子是单自由度 X_t，其映射形式为

$$X_{t+1} = f(X_t), \tag{3.17}$$

这里 f 具有离散平移不变性

$$f(n + x) = n + f(x), \quad n \text{ 为整数}; \quad f(-x) = -f(x). \tag{3.18}$$

那么，X_t 就形成一个中心位于每个整数 n，单位长度的元胞上的扩散过程. 一个承受周期势 $V(\varphi)$ 的约瑟夫森结，就是一个满足方程 (3.18) 的物理系统的例子，那里 X_t 表示成相角 φ，在大摩擦极限下按照

$$\frac{{\rm d}\varphi}{{\rm d}t} = \varGamma V(\varphi) \tag{3.19}$$

的规律演化. 函数 $f(\varphi) = \varphi + \varGamma \Delta t V(\varphi)$ 满足方程 (3.18). X_t 的动力学在一个给定的元胞内包含长的层流序列，被对应于从一个元胞转换到另一个元胞的阵发混沌

所中断. 这些层流序列导致在一个元胞内的一个宽的等待时间分布. 图 3.5 画出了这种映射. 在每个整数附近，f 被一个指数 α 所表征：

$$X_{t+1} = X_t + aX_t^{\alpha} + \cdots . \tag{3.20}$$

那么，每个整数就是一个边缘稳态固定点，并且指数 α 越大，一条轨道所花费的接近每一元胞心的时间就越长，而远离那些区域的 f 的细节并不是重要的.

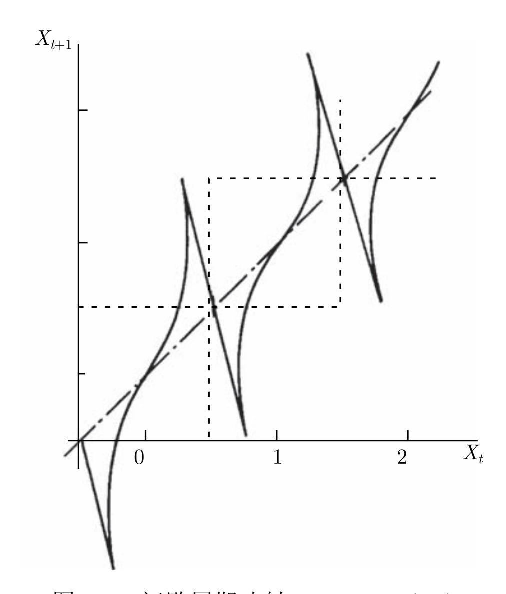


图 3.5 间歇周期映射：$X_{t+1} = f(X_t)$

接近每个固定点的运动可以近似方程 (3.20) 的连续时间解:

$$X_t = [X_0^{1-\alpha} - a(\alpha-1)t]^{-1/(\alpha-1)}, \tag{3.21}$$

因此，我们得到等待时间 τ 作为位置的函数，在这个位置上发生了重新注入，

$$\tau(X_0) = (X_0^{1-\alpha} - 2^{\alpha-1})/[a(\alpha-1)]. \tag{3.22}$$

这允许人们从重新注入点的未知分布 $\rho(X_0)$ 中提取等待时间分布 $\psi(\tau)$；对于大的 τ，$\psi(\tau)$ 的行为仅依赖于接近 $X_0 = 0$ 的 ρ 中的一个；假设 $\rho(X_0 = 0) \neq 0$ 或 ∞，方程 (3.22) 导致

$$\psi(\tau) \sim \tau^{-(1+\mu)}, \quad \mu = 1/(\alpha-1). \tag{3.23}$$

故间歇诱发一个宽的等待时间分布，扩散行为的结果为

$$\overline{X_t^2} \sim \begin{cases} t, & 1 < \alpha < 2, \\ \dfrac{t}{\ln t}, & \alpha = 2, \\ t^{2\nu}, & 2\nu = \dfrac{1}{\alpha - 1}, \quad \alpha > 2. \end{cases} \tag{3.24}$$

3.2.4　反常扩散实验

由于俘获而产生的反常扩散的实例：如图 3.6 所示，一个线性排列的传输带鼓轮上的反常扩散. 感兴趣的问题是追踪一个粒子在一维传输带鼓轮阵列上的运动，粒子既沿着流线迁移，也经历扩散 (扩散常数为 D_0)，后者导致粒子在不同的流线上跳跃. 基本的观测是每个鼓轮扮演着一个“陷阱”，当 $\tau \leqslant L^2/D_0$ (L 是鼓轮的直径)，它具有一个按照 $\psi(\tau) \sim \tau^{-(1+\mu)}$ 衰变规律的释放时间分布. 因为不同的访问者到达一个给定的鼓轮时具有不同的扩散历史，总的时间是独立和宽分布随机变量之和. 经过 t 时间后，被访问的鼓轮数目约为

$$N \sim t^{\mu/2}, \quad \mu < 1. \tag{3.25}$$

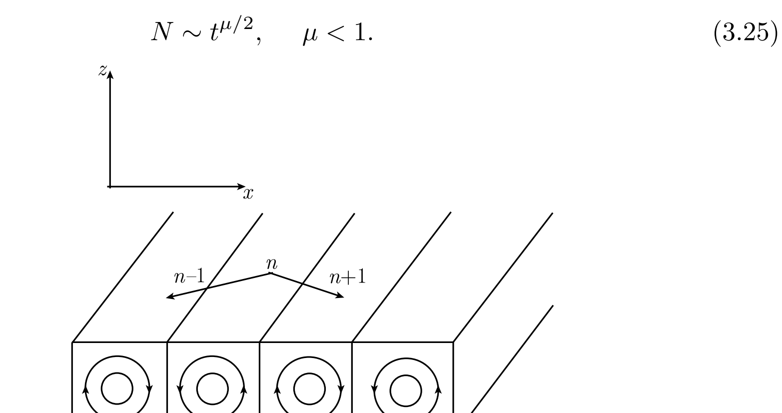


图 3.6　一维传输带鼓轮阵列

为了理解宽分布和 μ 值的起源，察看离散的流线将是方便的，从 $i = 1$(对应于鼓轮的边缘) 数到 $i = S$. 粒子在空间作无规行走，循环传输运动被添加在其上. 离开鼓轮的概率正比于第一次退回到 $i = 1$ 态的概率，经过 m 步，当然 $m^2 \ll S$，这个概率写作：$P_1(m) \sim m^{-3/2}$. 现在，用 θ_i 表示追踪者在第 i 个线完成一周需要的时间，粒子花费的总时间等于

$$\tau = \sum_{i=1}^{m} \theta_i. \tag{3.26}$$

这里，边界条件是被水平鼓轮所强加的，我们假设阱附近的速度行为是 $V(z) \sim V_0(z/L)^\beta$. 其中 $\beta = 0$ 对应于自由边界；$\beta = 1$ 描写了固体情形，即没有滑动边界.

流守恒意味着第 i 条流线位于离水平鼓轮的距离 $(i/S)^{1/(\beta+1)}L$ 处，并且传输时间是 $\theta_i \sim (L/V_0)(S/i)^{\beta/(\beta+1)}$. 现在，经过 j 步，粒子在第 i 线的概率简单地表示为

$$P(i,j) \sim j^{-1/2}\mathrm{e}^{-i^2/j}, \tag{3.27}$$

平均输运时间 $\bar{\theta}_j$ 依赖于 j，

$$\bar{\theta}_j = \sum_i \theta_i P(i,j) \sim j^{-\beta/2(\beta+1)}, \tag{3.28}$$

那么，

$$\tau = \sum_{j=1}^{m} \bar{\theta}_j \sim m^{(\beta+2)/2(\beta+1)}. \tag{3.29}$$

这是基本的物理结果：除非 $\beta = 0$，否则跳跃时间和步数并不互相成正比；尤其是因为粒子接近阱底时的速度消失，所以第一环花费很长的时间. 为了完善这个论点并获得 μ 的值，我们写出

$$\psi(\tau)\mathrm{d}\tau = P_1(m)\mathrm{d}m, \tag{3.30}$$

得到 $\mu = (1+\beta)/(2+\beta)$.

这一图像告诉我们，不仅侵入鼓轮的数目具有时间相关性，而且扩散的轮廓还遵守莱维定律，结果是

$$P(X,t) = \frac{1}{t^{\mu/2}} f_{\mu/2}(|X|/t^{\mu/2}). \tag{3.31}$$

特别是，对于 $\beta = 1$，$\mu/2 = 1/3$，莱维定律能用贝塞尔函数来表达，那么

$$P(X,t) \simeq \sqrt{|X|/t} K_{1/3}[|X|^{3/2}/t^{1/2}], \tag{3.32}$$

这个公式与实验结果符合得很好.

3.3 长程关联

3.3.1 关联的实用性

当被求和的随机变量不是互相独立的，那么通常的中心极限定理的条件不被满足，以前的分析需要发展. 十分明显的是长程关联将修改“正常”行为，而非常短程关联则可忽略.

让我们考虑一组随机变量 l_k，其关联函数定义为

$$C(n) = \langle l_k l_{k+n} \rangle - \langle l_k \rangle \langle l_{k+n} \rangle, \tag{3.33}$$

对于稳定过程而言，其仅依赖于差 n. 假设 $\langle l_k \rangle = 0$，$X_N = \sum_{k=1}^{N} l_k$ 的方差写作

$$\overline{X_N^2} = NC(0) + 2\sum_{k=1}^{N}(N-k)C(k). \tag{3.34}$$

下面分两种情况加以分析：

(1) 当 $N \to \infty$，$\sum_{n=1}^{N} C(n)$ 收敛，也就是说 $C(n)$ 在大 n 极限下衰减的比 n^{-1} 要快. 此情况下，有

$$\overline{X_N^2} \sim N\left(2\sum_{n=1}^{\infty} C(n) + C(0)\right) \quad (N \to \infty), \tag{3.35}$$

从而，X_N 还是具有 $\sqrt{N}$ 的行为，仅前置因子 (扩散常数) 被关联所修改. 在这个意义上，短程关联是无关紧要的. 当然，当关联有一个有限范围，例如，$C(n)$ 按指数衰减，这种情况也会出现，不过判据并不是严格的，故在布朗运动中可以引入有限范围关联.

(2) 与 (1) 相反的是长程关联，当 $C(n)$ 按照 n^{-1} 或更慢地衰减 (例如，$C(n) \sim n^{-y}$，$y < 1$)，那么 X_n 的典型行为就要被关联所修改. 根据方程 (3.34)，当 N 很大时，求和用积分代替，则有

$$\overline{X_t^2} \sim N\int^{N} C(n)\mathrm{d}n \sim \begin{cases} N^{2-y} & (y < 1), \\ N\ln N & (y = 1). \end{cases} \tag{3.36}$$

因此，扩散被关联所放大：X_N 的典型值比 $\sqrt{N}$ 要大. 完全关联的极端情况 (所有变量相等) 被 $y = 0$ 所描写，这导致弹道扩散的结果：$X_N \sim N$.

3.3.2 极限分布的形状

当关联是短程的，即以上的第一种情况，可以证明变量之和的极限分布保持高斯. 这在证明中心极限定理已经看到：当将特性函数展开，则存在 k^2 项，对于马尔可夫过程，或有限范围记忆的更一般过程，变换矩阵技术能用来获得这个结果. 然而，长程关联所导致的极限分布偏离了高斯型态，例如，聚合物问题、自旋模型在临界点的磁化分布等. 在这些情况下，极限分布依赖于关联的细节.

3.3.3 几何关联和反常扩散

现在我们来分析以上统计机制的物理意义. 其实，关联并不是人为地引入到模型之中，而是由过程本身的动力学产生的.

一个简单的例子是二维分层介质，见图 3.7，动力学诱发长程瞬间关联，这导致反常扩散. 在每一层，速度 $V(Z)$ 是一个沿着层的定向常量. 下面，$V(Z)$ 将是一

个随机变量，仅依赖于层位置 Z，而没有内层关联. 这个模型被用来研究多孔聚合体存在大尺度渗透，从而有速度涨落.

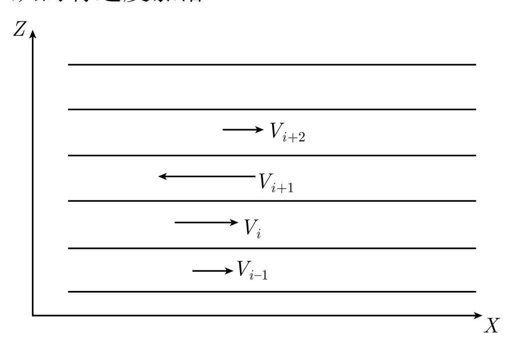


图 3.7 二维模型示意图

这是一个破缺系统的实例：两个统计过程被包含了，即 $V(Z)$ 分布；一个给定 $V(Z)$ 的不同行走 (热历史). 一个行走者在时间 t 的位置依赖于这两者，那么当人们讨论统计特性时，就要将注意力花费在这个事实上. 在真实的实验中，人们一般感兴趣于一个给定 $V(Z)$ 的行走者的行为. 本节不详细讨论系综平均的问题，而是指出导致反常扩散的统计机制.

3.3.4 扩散行为

横向运动 (关于流) 是正常的布朗行走，$\overline{Z^2}=2D_\perp t$，以致于粒子访问每层要花费大量的时间，粒子经过 t 时间后在初始层的概率约为

$$P_0(t)\sim(D_\perp t)^{-1/2}, \tag{3.37}$$

这意味着量级在 $\sqrt{D_\perp t}$ 的不同层被粒子试探了，它们中的每层去过 $N_{id}(t)\sim t/\sqrt{D_\perp t}$ 次. 换句话说，沿着 Z 的一维运动诱发了粒子速度的瞬间关联

$$\langle\dot{X}_{t=0}\dot{X}_t\rangle\sim\frac{\sigma_V}{\sqrt{D_\perp t}},\quad \sigma_V=\int_{-\infty}^{\infty}V^2\rho(V)\mathrm{d}V. \tag{3.38}$$

沿着 X 方向的总位移是行走者所看到的速度. 按照前一节，我们有

$$\sqrt{\overline{X_t^2}}\sim\sqrt{\sigma_V/D_\perp^{1/2}}t^{3/4}, \tag{3.39}$$

这个模型表明了关联诱发超扩散.

讨论

(1) 在实验室，我们必须在以前的超扩散中添加对流运动 $X_t=\langle V\rangle t$，但如果平均速度 $\langle V\rangle$ 不是严格平行于层，那么扩散将是渐进正常的，这是因为粒子访问的层数的量级为 t；如果在 Z 方向的样本是有限的，扩散也是正常的.

(2) 若速度场是强烈破缺的，即 $\langle V^2\rangle - \langle V\rangle^2 = \infty$ (例如，当 $V \to \infty$，$\rho(V) \sim V^{-(1+\mu)}$)，则扩散是相当快的，

$$X_t \sim \sqrt{\frac{t}{D_\perp}} \sum_{i=1}^{\sqrt{D_\perp}t} V_i \sim D^{(1/\mu-1)/2} t^{(1/\mu+1)/2} \quad (1<\mu<2); \tag{3.40}$$

(3) 如果流剖面不是随机的，而是一个抛物流，$V(Z) \sim Z^2$; 或者是一个剪切流，$V(Z) \sim Z$，那么有

$$X_t \sim \sqrt{\frac{t}{D_\perp}} \int_0^{\sqrt{D_\perp t}} \mathrm{d}Z V(Z) \sim D_\perp^{\beta/2} t^{1+\beta/2}, \tag{3.41}$$

其中，$\beta = 1$ 是剪切流，$\beta = 2$ 为抛物流情况.

3.4 俘获、位垒和无规力

3.4.1 模型

模型 A—— 俘获 每个晶格态皆被考虑成一个具有平均停留时间 τ_n 的陷阱，见图 3.8(a).

$$W_{nm} = \frac{1}{z\tau_m}, \quad W_{mn} = \frac{1}{z\tau_n}, \tag{3.42}$$

这里，z 是晶格坐标的数目. 主方程写作

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P_n(t) = \sum_m \frac{1}{z\tau_m} P_m(t) - \frac{1}{z\tau_n} P_n(t), \tag{3.43}$$

满足的平衡态分布为

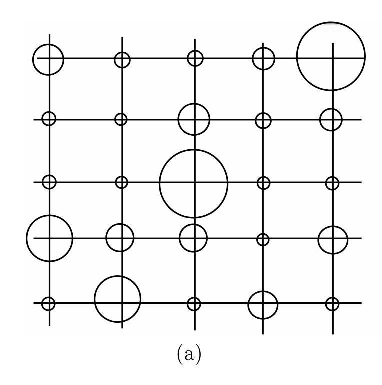
$$P_n^{\mathrm{eq}} \propto \tau_n. \tag{3.44}$$

模型 B—— 对称位垒 每条晶格连接线扮演着一个对称位垒，见图 3.8(b).

$$W_{nm} = W_{mn}, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P_n(t) = \sum_m W_{nm} \left[P_m(t) - P_n(t)\right], \tag{3.45}$$

在这种情况下，平衡分布是均匀的，即 $P_n^{\mathrm{eq}} =$ 常数.

模型 C—— 无规力 在每个晶格连线上存在着一个力 $F_{nm}(= -F_{mn})$，见图 3.9，转移速率是激活的，


(a)

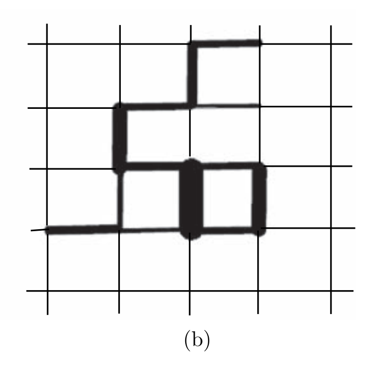
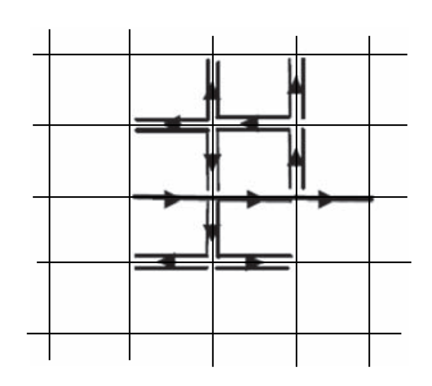

(b)

图 3.8
(a) 模型 A 的示意图，沿着静止的随机陷阱的扩散；(b) 模型 B 的示意图，随机位垒控制局域流

$$W_{nm} = W_0 \exp(-F_{nm}a/2k_\mathrm{B}T), \quad W_{mn} = W_0 \exp(+F_{nm}a/2k_\mathrm{B}T), \tag{3.46}$$

式中，T 为温度，k_B 是玻尔兹曼常量. 这个模型一般并不满足细致平衡原理，稳定态将伴随着局域流. 仅当力 F_{nm} 是一个势 U 的梯度，$F_{nm} = (U_n - U_m)/a$，则平衡态存在，具有玻尔兹曼形式：$P_n^{\mathrm{eq}} \sim \exp(-U_n/k_\mathrm{B}T)$；相反的情况，$\boldsymbol{F}$ 是无散的，$\nabla\boldsymbol{F} = 0$，对应于一个不可压缩流体流，这导致具有闭合流的稳定. 这种情况下，稳定态写作：$P_n = P_0 =$ 常数，同时有

$$J_{mn} = (W_{mn} - W_{nm})P_0 = 2W_0P_0 \sinh(aF_{nm}/2k_\mathrm{B}T). \tag{3.47}$$


图 3.9 模型 C 的示意图：随机力产出一个局部随机偏压

下面，对于一个任意维数的晶格，我们来分析这三种模型所给出的粒子扩散行为.

3.4.2 电子和力学问题的等价性

以上的扩散问题具有非常实际的电子和力学模拟重要性. 位于图 3.10 所显示

的电阻网络中的某一节点电容 C_n 上的电量随时变化方程为

$$\frac{\mathrm{d}q_n}{\mathrm{d}t}=\sum_m \sigma_{nm}\left(q_m/C_m-q_n/C_n\right), \tag{3.48}$$

式中，σ_{nm} 是电导率. 做如下代换后，这等价于一个主方程，

$$P_n(t)\leftrightarrow q_n(t),\quad W_{nm}\leftrightarrow \sigma_{nm}/C_m. \tag{3.49}$$

上述三种模型对应于如下的选择.

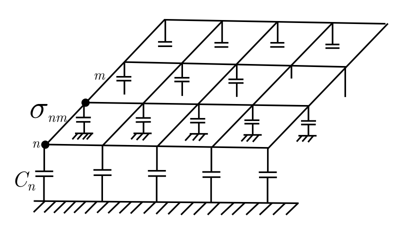


图 3.10　随机电阻网络，每个节点与地用随机电容相连接

(1) 对于俘获模型 A，C_n 随机而 $\sigma_{nm}=\sigma$，局域俘获时间定义为 $z\tau_n=C_n/\sigma$，这是电容 C_n 的局部时间常数；

(2) 对于对称位垒模型 B，$C_n=C$ 而 σ_{nm} 随机，则 $W_{nm}=\sigma_{nm}/C$. 在这种情况下，电势 $V_n=q_n/C$ 满足相同的方程，平衡情形显然为 $V_n=$ 常量；

(3) 对于模型 C 而言，C_n 随机而 $\sigma_{nm}\sim\sqrt{C_nC_m}$，这里，$C_n=\exp(U_n/k_\mathrm{B}T)$.

1. 随机陷阱

在连续时间无规行走模型中已经处理过这个问题，即这个问题的“退火”版本. 现在我们提出一个非常相似的方式来重新研究这个问题，所不同的是，对每一个给定的态，每次访问它是相等的.

(1) 如果 $\langle\tau\rangle$ 是有限的，对于大 N，无论 τ_i 是否关联，t 的行为均为 $N\langle\tau\rangle$，那么扩散行为与 CTRW 模型的相同，

$$\overline{X_\alpha^2}\sim 2D_{\alpha\alpha}t,\quad D_{\alpha\alpha}=\frac{l_\alpha^2}{2\langle\tau\rangle}. \tag{3.50}$$

(2) 如果 τ_i 满足一个宽分布 $[\tau\to\infty,\ \psi(\tau)\sim\tau^{-(1+\mu)}]$，这里 $0<\mu<1$，那么 $\langle\tau\rangle$ 是无限的，以致于我们必须合理地处理 $t=\sum\limits_i^n\tau_i$ 求和中的关联，也就是要估计其中有效独立俘获时间的数目，即俘获之间布朗运动访问的不同态的数目 S_N，结果为

$$S_N\sim\begin{cases}N^{d/2}, & d<2,\\ N/\ln N, & d=2,\quad N\to\infty,\\ N, & d>2.\end{cases} \tag{3.51}$$

其中，d 为维数. 上节的宽分布结果可以用来求和：$t\sim(N/S_N)\sum\limits_{i=1}^{S_N}\tau_i$，导致

$$t \sim \begin{cases} NS_N^{1/\mu-1}, & 0<\mu<1, \\ t \sim N\ln S_N, & \mu=1. \end{cases} \tag{3.52}$$

比较 (3.51) 式和 (3.52) 式，我们有如下结果.

(1) 若 $d>2$，当 $N\to\infty$，每次俘获仅被访问有限次数，扩散行为中的关联并不是足够强，则

$$\overline{X_\alpha^2} \sim \begin{cases} t^\mu, & 0<\mu<1, \\ t/\ln t, & \mu=1. \end{cases} \tag{3.53}$$

(2) 若 $d<2$，当 $N\to\infty$，每个态经常被访问无限次，有 $t\sim N^{1-d/2+d/2\mu}$，则一个新的扩散行为出现：

$$\overline{X_\alpha^2} \sim \begin{cases} t^{2\nu}, \quad 1/\nu=2-d+d/\mu, & 0<\mu<1, \\ t/\ln t, & \mu=1. \end{cases} \tag{3.54}$$

(3) 当 $d=2$，上式被修改为对数项：

$$\overline{X_\alpha^2} \sim t^\mu(\ln t)^{1-\mu}, \quad 0<\mu<1. \tag{3.55}$$

(3.53) 式和 (3.56) 式两结果首次是由 Machta(Machta, 1985) 用实空间的重整化方法获得的.

在图 3.11 中，扩散指数 ν 被画成维数 d 的函数. 注意到与正常情况对比，当维数增加扩散变慢，这是因为随着 d 值增加，以一个长的俘获时间去访问一个态的概率增加，即对大 d 情况，S_N 增长变快. 这些深度俘获控制着扩散过程，其中最大的俘获时间的量级为

$$\tau_{\max} \sim S_N^{1/\mu} \sim \begin{cases} t^{\nu d/\mu}, & d<2, \\ t^{1/\mu}, & d>2. \end{cases} \tag{3.56}$$

故对于小维度情况，增长变慢.

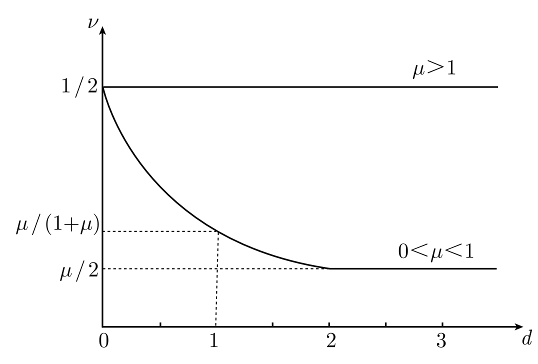


图 3.11　模型 A 的扩散指数 ν 作为空间维数 d 的函数

2. 随机位垒

随机位垒模型等价于一个随机电阻网络，一维和多维有着非常不同的扩散行为.

在一维 ($d=1$) 情况下，问题可以简化为包含了一系列附加的随机电阻，$\sigma_i^{-1}=(CW_{i,i+1})^{-1}$. 一个具有 N 个单位链 (对扩散过程就是 N 步跳跃) 的总传导率等于

$$\frac{N}{\sigma(N)}=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\sigma_i}, \tag{3.57}$$

另外，两种情况必须区分开来讨论.

(1) 如果 $\langle W^{-1}\rangle$ 有限，那么总的传导率当 N 很大时有一个有限的极限值，

$$\frac{1}{\sigma}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^{-1}\overrightarrow{N\to\infty}\left\langle\frac{1}{\sigma}\right\rangle, \tag{3.58}$$

传导率与扩散常数是有关的，后者也是有限的，其为

$$D=a^2\sigma/C=a^2\langle 1/W\rangle^{-1}. \tag{3.59}$$

(2) 如果 $\langle W^{-1}\rangle=+\infty$，例如, $1/W_{i,i+1}$ 有一个宽分布，

$$\psi(W)\sim W^{\mu-1},\quad 0<\mu\leqslant 1,\quad (W\to 0), \tag{3.60}$$

从而对大尺度而言，总的传导率消失，即

$$\sigma(N)\sim\begin{cases} N^{1-1/\mu}, & 0<\mu<1,\\ (\ln N)^{-1}, & \mu=1.\end{cases} \tag{3.61}$$

假设 X 的有效扩散常数 $D(X)=\overline{X^2}/t$，则扩散行为与 $\sigma(N)$ 具有相同的尺度. 这导致一个欠扩散律 $D(X)\sim X^{1-1/\mu}$，所以

$$\overline{X^2}\sim\begin{cases} t^{2\nu},\quad \nu=\mu/(1+\mu), & 0<\mu<1,\\ t/\ln t, & \mu=1.\end{cases} \tag{3.62}$$

讨论

(1) 在一维情况下，只要假设 $W_{n,n+1}=W_{n+1,n}=1/2\tau_n$，那么随机位垒模型的渐进扩散行为就与随机俘获模型的相同，这在物理基础上是预期的. 对于一个给定的连接，总是可以找到一个能量位垒近似等于这个连接，且位于一个有限的距离. 在一维情况下，被两个近似相等的位垒划界的区域，在晶格的粗粒化图像下能看做一个有效的陷阱. 位垒和随机陷阱在大尺度 (长时间) 扮演相似的角色.

(2) 一维节点和连接破缺存在着一种对偶关系，特别是对于对称位垒情况，流 $J_{n,n+1} = W_{n,n+1}(P_n - P_{n+1})$ 的时间演化满足

$$\frac{1}{W_{n,n+1}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} J_{n,n+1} = J_{n+1,n+2} + J_{n-1,n} - 2J_{n,n+1}, \tag{3.63}$$

该方程满足 $2\tau_n P_n$，这与俘获模型的 $2\tau_n = W^{-1}_{n,n+1}$ 相符合.

3. 连续无规力模型

前述结果表明具有连接破缺的跳跃不对称模型，在不事先假设跃迁速率具有宽分布的情况下，可以导致反常扩散. 现在我们通过①统计力学的知识作出物理解释；②一些解析结果，来研究反常扩散行为. 之所以这样做是因为随机力模型的连续空间描述是非常有用的，允许精确地计算某些物理量.

连续无规力模型定义为

$$W_{n,n+1} = \frac{T}{\gamma a^2} \mathrm{e}^{-aF_n/2T}, \quad W_{n+1,n} = \frac{T}{\gamma a^2} \mathrm{e}^{+aF_n/2T}, \tag{3.64}$$

其中，F 满足高斯分布：$\langle F \rangle = F_0$ 且 $\langle F_n F_m \rangle = (\sigma/a)\delta_{n,m}$. 其对应的主方程在连续极限 $(a \to 0)$ 下退化为下列的朗之万方程：

$$\gamma \dot{x} = F(x) + \eta(t), \tag{3.65}$$

这里，$F(x)$ 是空间上的高斯白噪声，$\eta(t)$ 为时间域上的高斯白噪声. 这一方程描写了一个粒子在一个随机介质中的运动. 在一维情况下，$F(x)$ 能被写作 $F(x) = -\mathrm{d}U/\mathrm{d}x$，$U(x)$ 是一个在 x 方向的“布朗运动”，图 3.12 显示了一个典型的状态. 易见在外部偏压作用下的粒子运动强烈地被势的涨落所抑制.

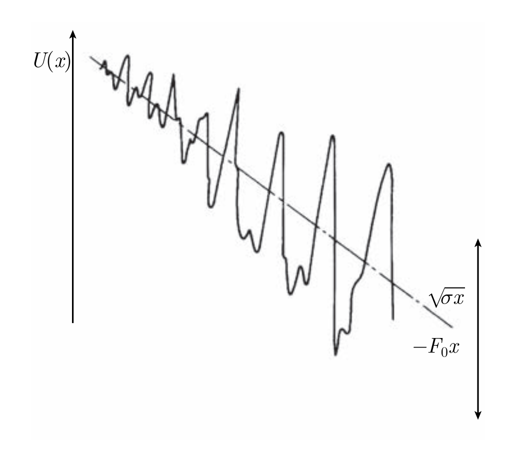


图 3.12 无规力模型所对应的势形状，$U(x)$ 围绕着平均斜率 $-F_0x$ 的涨落，其宽度随 x 以 $\sqrt{\sigma x}$ 增长

速度和扩散常数　对于一个高斯力 F，有

$$\langle (W_{n,n+1}/W_{n+1,n})^k \rangle = \langle \mathrm{e}^{-(aF_n/T)k} \rangle = \mathrm{e}^{-(a\sigma/2T^2)k(\mu-k)}, \tag{3.66}$$

式中，μ 是一个无量纲参数，

$$\mu = \frac{2F_0 T}{\sigma}, \tag{3.67}$$

μ 是外力移动粒子一个晶格长度所做功 $F_0 a$ 乘以热能量后与能量涨落的平方 σa 之比. 应用方程 (3.64) 和 (3.67) 到这种特殊情况，我们发现：

(1) $0 < \mu < 1$：$\langle W_\leftarrow / W_\rightarrow \rangle \geqslant 1$，那么 $V = 0$；

(2) $1 < \mu < 2$：$\langle W_\leftarrow / W_\rightarrow \rangle < 1 < \langle (W_\leftarrow / W_\rightarrow)^2 \rangle$，则速度有限且可写作

$$V = V_0(1 - 1/\mu), \tag{3.68}$$

其中，$F_0/\gamma = V_0$ 为粒子不存在破缺的媒介中的平均定态速度，在这个相中，扩散系数为无限.

(3) 当 $\mu > 2$ 或 $\langle (W_\leftarrow / W_\rightarrow)^2 \rangle < 1$，$V$ 和 D 皆是有限的；V 保持与上式相同的形式，而 D 可写作

$$D = D_0 \frac{\mu - 1}{\mu - 2}, \tag{3.69}$$

裸扩散常数 $D_0 = T/\gamma$. 注意在正常系统 ($\sigma \to 0$，$\mu \to \infty$) 极限下，有 $D = D_0$.

V/V_0 和 D/D_0 随 μ 的变化结果被总结在图 3.13. 注意到这两个量对不同的控制参数的行为是奇异的，这经常在破缺的物理系统中发现.

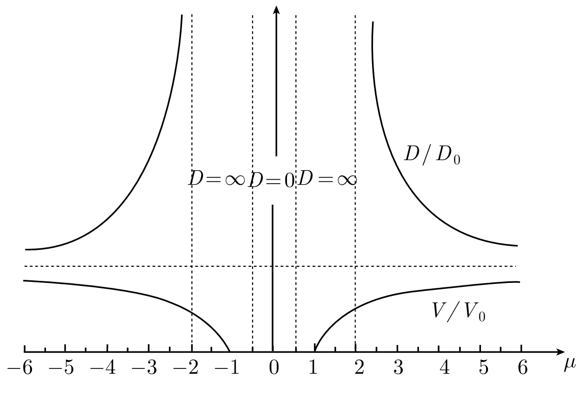


图 3.13　速度和扩散常数作为 μ 的函数图像

唯一地控制输运行为的参数是 μ，它与晶格常数 a 和黏滞系数 γ 无关，其值随着偏压和温度的增加而变大，而随破缺变强而降低. 出现了速度消失的相，这意

味着位置和时间的关系是欠线性的，即 $\langle x(t)\rangle \sim t^{\alpha}$ $(\alpha<1)$；而扩散常数发散表明了一个事实：概率分布随时间的展宽比 $t^{1/2}$ 快，即 $x-\bar{x}\sim t^{\nu}$.

讨论

现在我们在物理上理解上述规律以及扩散指数是如何计算的.

(1) 对于一个不对称模型，存在两个扩散相：

$$\langle W_{\leftarrow}/W_{\rightarrow}\rangle \geqslant 1;\quad \langle W_{\leftarrow}/W_{\rightarrow}\rangle < 1 \leqslant \langle (W_{\leftarrow}/W_{\rightarrow})^2\rangle. \tag{3.70}$$

在连续近似下，这分别对应于 $0<\mu\leqslant 1$ 和 $1<\mu\leqslant 2$ 情况.

(2) 长度和时间尺度.

目前的问题其实是一个粒子在一个势中的热激活运动，方案见图 3.12. 紧迫的任务是挑选出两个长度尺度. ①涨落能量 $\sqrt{\sigma x}$ 与外力提供的平均能量 $-F_0x$ 的比较；②涨落能量与热能量 T 的比较. 如果 $x\ll x_0=\sigma/F_0^2$，那么粒子的运动主要由能量涨落来确定，而对于平均偏压 F_0 并不敏感. 热能量 T 允许粒子扩散到 $\sqrt{\sigma x}\sim 2T$(或者 $x\sim x_1=4T^2\sigma^{-1}$)，而不受势涨落的太大影响；这个距离相当于粒子经过一个自由扩散时间：

$$\tau_1=\frac{x_1^2}{2D_0}=\gamma\frac{8T^3}{\sigma^2}, \tag{3.71}$$

就能被达到.

现在，当 $x_0\gg x_1$ 或 $x_1\gg x_0$，将有两个不同的物理情况发生. 前者意味着在粒子能够感受到外力之前，在尺度 x_1 处被强涨落势所牵制住，然后必须等待从热库中获得一个大能量涨落 $\Delta E\gg T$，去克服势垒而继续这种方式的运动.

另一方面，若 $x_1\gg x_0$，热能量则能把粒子带到足够远，以致于平均偏压 F_0 超过了力涨落；相继的运动仅能被在尺度 x_1 发生的、稀有的、非常大的力涨落来放慢. 相对控制参数为

$$\frac{x_1}{x_0}=\left(\frac{4T^2}{\sigma}\right)\frac{F_0^2}{\sigma}\equiv\mu^2, \tag{3.72}$$

或者等价地，相应于尺度 x_0 的能量位垒与热能量之比，

$$\frac{\Delta U(x_0)}{2T}=\frac{\sigma}{2TF_0}=\frac{1}{\mu}. \tag{3.73}$$

由 (3.72) 式和 (3.73) 式可见，$\mu=1$ 并不对应于一个相交区域，而是一个纯粹的相变，即将零速度 $(\mu<1)$ 从一个有限速度区域分离出来.

以上的物理分析建议：粒子的运动在大尺度上能被看成在区域 x_1 内的一系列俘获事件，其由一个释放时间分布所表征，也就是粒子为了收到合适的热能量所需

要的时间. 事实上，弛豫时间和等待时间分布能给出一个闭合形式的解，从而表明两者皆具有宽分布形式.

(3) 当外部偏压消失，即 $F_0 = 0$，或者更一般地说，$\langle \ln(W_{\leftarrow}/W_{\rightarrow}) \rangle = 0$，以前定义的长度 x_0 发散，那么粒子仅能依靠热库提供的能量通过或克服涨落能量势垒，为了跨越一个 x 距离，粒子必须获得量级为 $\sqrt{\sigma x}$ 的能量，这需要花费的时间满足 Arrhenius 定律：

$$t \simeq \tau_1 \exp(\sqrt{\sigma x}/2T), \tag{3.74}$$

这里，τ_1 具有试验频率倒数的量级. 这个公式表明：

$$\langle x(t) \rangle = 0, \quad \langle x^2(t) \rangle = C x_1^2 [\ln(t/\tau_1)]^4. \tag{3.75}$$

以上公式亦给出了粒子到达 x 所需要的时间，不过人们要问：这个时间对不同的出发点的平均是什么？文献 (Noskowicz et al., 1988) 得到的结果是

$$\langle t(x) \rangle = \left\langle \exp\left(-\frac{1}{2T}\int_0^x F(z)\mathrm{d}z\right)\right\rangle = \mathrm{e}^{\sigma x/8T^2}. \tag{3.76}$$

这比典型的时间尺度要长很多.

非零偏压诱发俘获时间的宽分布

$$p(\tau)\mathrm{d}\tau = p(\Delta U)\mathrm{d}(\Delta U) \;\rightarrow\; \lim_{\tau\to\infty} p(\tau) \sim \tau^{-(1+T/T_0)}, \tag{3.77}$$

能量位垒的指数分布的起源能从二元模型来理解，其中局域力等于 F_0 的概率是 $1-p$, 等于 $-F_0$ 的概率等于 p.

显然，遇到一系列不适宜长度为 Na 的漂移的概率等于 $p(N) \simeq p^N$，而对应的位垒高度是 $\Delta U = NaF_0$，所以

$$p(\Delta U) \simeq \mathrm{e}^{-\Delta U/2T_0}, \quad 2T_0 = \frac{aF_0}{\ln p}. \tag{3.78}$$

让我们描述连续模型 (3.65) 式的位垒涨落分布的长时行为，而其推广到关联随机力模型也是容易的. 定义 $p_L(\Delta U)$ 为在 $x=0$ 处势能是 $U=0$，而在 $x=L$ 处势能是 $U=\Delta U$ 的概率，

$$\begin{aligned} p_L(\Delta U) &\simeq \int \mathrm{d}F \delta\left(\int_0^L F(x)\mathrm{d}x + \Delta U\right) \exp\left\{-\int_0^L \mathrm{d}x \frac{[F(x)-F_0]^2}{2\sigma}\right\} \\ &\simeq \int \mathrm{d}F \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \exp\left(\int_0^L \mathrm{d}x \left\{\frac{\mathrm{i}k\Delta U}{L} + \mathrm{i}kF(x) - \frac{[F(x)-F_0]^2}{2\sigma}\right\}\right). \end{aligned} \tag{3.79}$$

若 L 足够大，则有

$$p_L(\Delta U) \propto \mathrm{e}^{-F_0\Delta U/\sigma}, \quad L \to \infty. \tag{3.80}$$

从而利用 $\tau \sim \exp(\Delta U/2T)$，那么当 $\tau \to \infty$，$p(\tau) \sim \tau^{-(1+\mu)}$. 这个结果显示俘获时间的宽分布出现在随机力模型之中，这是不对称跃迁模型的一般性质.

3.4.3　随机场伊辛模型的应用

如果一个磁畴壁有一个大的表面张力，它在一个破缺媒介中演化，这与一个点粒子在随机力作用下的情形相同，并且可以用一维随机场伊辛模型中的一个畴壁来模型化，见图 3.14.

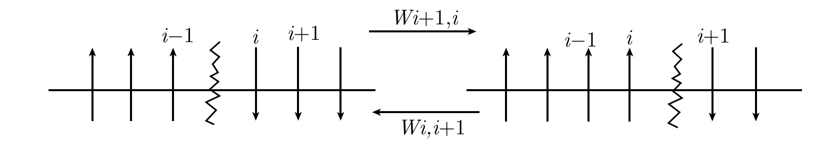


图 3.14　一维随机场伊辛模型中的畴壁

考虑存在一个随机磁场的一维伊辛模型，它的哈密顿量写作

$$H = -J\sum_i S_i S_{i+1} - \sum_i h_i S_i, \tag{3.81}$$

其中，$S_i = \pm 1$，并且

$$\langle h_i \rangle = h, \quad \langle h_i h_j \rangle - h^2 = \sigma_h \delta_{ij}. \tag{3.82}$$

因而在自旋向上和向下之间有一个畴壁，见图 3.14. 假设在单一自旋蹦跳动力学机制框架下，它将按照下列的跃迁速率演变：

$$W_{i,i+1} = W_0\mathrm{e}^{\Delta H/2T}, \quad W_{i+1,i} = W_0\mathrm{e}^{-\Delta H/2T}, \tag{3.83}$$

其中, ΔH 代表自旋由 S_i 变成 $-S_i$ 所引起的能量变化，即 $\Delta H = 2h_i$. 这些跳跃速率与上述模型精确地相对应，在目前的情况下

$$\mu = \frac{hT}{\sigma_h}, \tag{3.84}$$

那么，仅当外场 h 超过一个临界值 h_c，畴壁将获得一个有限的速度；对于 $h < h_c$，畴壁将按照如下的规律蠕变，

$$\langle x(t) \rangle / a \sim (T^2/\sigma_h)^{1-2\mu}(W_0 t)^{\mu}. \tag{3.85}$$

这种分析允许我们去讨论以下的问题：假设样本已经准备在 $S_i = -1$ 态，然后一个外场 h 突然加进来，那么自旋向上的区域将成核，并且按照上述定律扩展. 如果 $h \ll J$，成核速率 (对应于一个正自旋的蠕变) 为

$$\varGamma = W_0 \mathrm{e}^{-J/T}, \tag{3.86}$$

整个系统的动力学将出现两个态.

第一态：系统一直等到由以下确定的时间 t_{c}，向自旋向上区域成核

$$x \simeq a(W_0 t_c)^{\mu}(T^2/\sigma_h)^{1-2\mu} \quad (\text{若}\mu < 1,\ \ \text{则}x = V t_{\mathrm{c}}); \tag{3.87}$$

并且

$$(x/a)\varGamma t_{\mathrm{c}} \simeq 1, \tag{3.88}$$

或者

$$W_0 t_{\mathrm{c}} \sim \begin{cases} \mathrm{e}^{J/T(1+\mu)}(T^2/\sigma_h)^{(2\mu-1)/(1+\mu)}, & \mu < 1, \\ (V\varGamma)^{-1/2}, & \mu > 1. \end{cases} \tag{3.89}$$

t_{c} 就是两个向上发展的区域碰到一起的时间，因为方程 (3.88) 表示在时刻 t_{c}，在被畴壁分开的距离内成核的概率是 1 的量级. 对于 $t \ll t_{\mathrm{c}}$ 和 $\mu < 1$，人们期待平均磁化为 $(\varGamma t)t^{\mu} - 1$，或者对于 $\mu > 1$ 的情况，平均磁化为 $\varGamma V t^2 - 1$.

第二态：当时间 t 是 t_{c} 的量级，则 M 近似等于平衡值 $M_{\mathrm{eq}} = 1$ (这里我们假设 $T \ll J$)，并且按照如下规律

$$|M - M_{\mathrm{eq}}| \sim t^{-\mu} \tag{3.90}$$

以慢方式弛豫到平衡态. 这一状态是稀有的，但是推翻连续的自旋是困难的. 图 3.15 显示了一维随机场模型中的总磁化强度作为时间函数的演化.

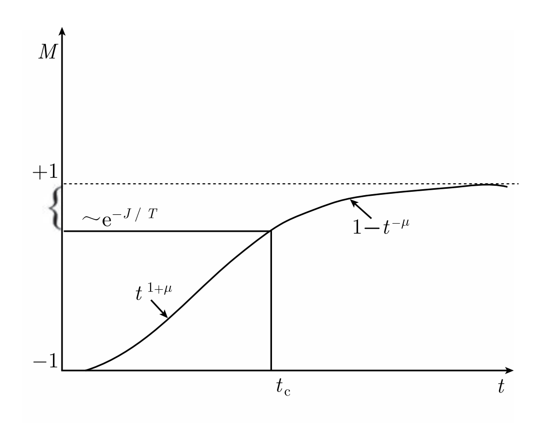


图 3.15　一维随机场模型中的总磁化强度作为时间函数的演化

小结

这里所有的非布朗运动特性起因于俘获时间的宽分布，其结果来自于指数稀有事件以指数型贡献到热激活时间. 能量位垒的指数 (或者泊松) 分布非常具有一般性. 以下是具有幂律衰减分布的俘获时间分布的系统的奇特行为.

(1) 扩散前沿具有莱维飞行稳态分布的特点.

(2) 随着 μ 的变化，一种“相变”即平均速度和扩散系数发散，这对应于宽分布 $\psi(\tau)$ 的前两次矩发散；非常重要的现象是一个“蠕变”相 (粒子速度为零) 和一个“流”相之间存在转变. 注意在这种情况下，速度连续地趋近零，这与其他一级“脱模”转变有所不同.

(3) 系统长时间后具有慢的弛豫，或者等价地说，噪声在低频处的功率谱被放大.

3.5 分数阶布朗运动

研究反常扩散与输运，除了数值方法以外，主要有两种解析模型：其一是连续时间无规行走模型 (CTRW); 其二是分数阶布朗运动模型 (FBM). 在前一个模型中，每次态转移被跳跃长度和等待时间两个随机变量所描述，它们分别从分布密度函数抽样产生. 连续时间无规行走理论包括：①若跳跃长度的方差有限而等待时间有一个无限长的特征时间，则扩散是欠扩散；②当平均等待时间有限而跳跃长度方差无限，即为莱维飞行，其中自由粒子方均位移发散，即使在简谐势中粒子的坐标二次矩也不存在；③在莱维行走中，跳跃长度和等待时间是耦合的，产生具有有限方差的欠弹道超扩散.

第二个模型是分数阶布朗运动，它是一个具有稳定增量的自相似高斯过程. 分数阶布朗运动的自由粒子的方均位移为

$$\langle x^2(t)\rangle = 2Dt^{2H}, \tag{3.91}$$

其中，H 是 Hurst 指数，$0 < H < 1$，D 是广义扩散系数. 规则布朗运动对应于 $H = 1/2$，$0 < H < 1/2$ 是欠扩散，$1/2 < H < 1$ 是超扩散.

分数阶布朗运动是由分数阶高斯噪声所产生，就像布朗运动是由白噪声产生一样. 在连续时间下，分数阶高斯噪声 $\xi_H(t)$ 被理解为分数阶布朗运动的导数，这是一个稳定的高斯过程. 特别是，将这种噪声作为一个内部噪声，其驱动的动力学过程就是分数阶朗之万方程.

1. 分数阶高斯噪声

分数阶布朗运动定义为

$$B_H := \frac{1}{\Gamma(H+1/2)}\left\{\int_0^t (t-\tau)^{H-\frac{1}{2}}\mathrm{d}B(\tau)+\int_{-\infty}^0[(t-\tau)^{H-\frac{1}{2}}-\tau^{H-\frac{1}{2}}]\mathrm{d}B(\tau)\right\}, \quad (3.92)$$

这里，Γ 代表伽马函数. 积分变量 $B(\tau)$ 是通常的布朗运动，即 $\mathrm{d}B(\tau)=\xi(\tau)\mathrm{d}\tau(\xi(\tau)$ 是白高斯噪声)，当 $H=1/2$，变量 $B_H(t)$ 退化到布朗运动坐标变量，方程 (3.92) 右端是两个独立的高斯过程之和. 在这个定义中，等式右边第一项称为黎曼–刘维尔型高斯过程. 标准的分数阶布朗运动，即方程 (3.92)，是一个高斯自相似过程. $B_H(t)$ 的方差等于 $2D_Ht^{2H}$，这里 $D_H=[\Gamma(1-2H)\cos(H\pi)]/(2H\pi)$. 兹在此将分数阶布朗运动的普遍特性总结为：$x(t)$ 有稳定的增量，当 $t\geqslant 0$，$x(0)=0$，$\langle x(t)\rangle=0$；$\langle x^2(t)\rangle = 2D_Ht^{2H}$；$x(t)$ 具有高斯分布.

分数阶布朗运动过程的最主要的两个特性是：

(1) 自相似性，这是因为对于所有 $a>0$ 和 $t>0$，存在如下关系：

$$B_H(at)=a^HB_H(t); \quad (3.93)$$

(2) 非稳定性，其自关联函数是

$$\langle x^H(t_1)x^H(t_2)\rangle = D_H(t_1^{2H}+t_2^{2H}-|t_1-t_2|^{2H}), \quad t_1,t_2>0. \quad (3.94)$$

现在能方便地从分数阶布朗运动而引入分数阶高斯噪声，定义为

$$x^H(t)=\int_0^t \mathrm{d}t'\xi_H(t'), \quad \xi_H(t)=\frac{\mathrm{d}x^H(t)}{\mathrm{d}t}, \quad t>0, \quad (3.95)$$

则分数阶高斯噪声 (FGN) 具有零平均特性

$$\langle \xi^H(t)\rangle = 0, \quad (3.96)$$

自关联函数能从方程 (3.94) 相对于 t_1 和 t_2 的微分而得到

$$\langle \xi^H(t_1)\xi^H(t_2)\rangle = 2D_HH(2H-1)|t_1-t_2|^{2H-2}+4D_HH|t_1-t_2|^{2H-1}\delta(t_1-t_2). \quad (3.97)$$

从中我们看到：D_H 发挥噪声强度的作用. 对于欠扩散 $(0<H<1/2)$，当 $t_1\neq t_2$，自关联函数是负的，意味着在一个方向的一次跳跃，更喜欢下一个跳跃在相反的方向；当 $1/2<H<1$，噪声是正关联，以致运动为超扩散，这意味着在相同方向的跳跃更容易成功.

分数阶高斯噪声的分布密度函数为

$$\psi(\xi_H)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\exp\left(-\frac{\xi_H^2}{4}\right), \quad (3.98)$$

方差是 2.

2. 分数阶朗之万方程

一种可供选择的描写布朗运动的方法是朗之万方程：

$$m\frac{\mathrm{d}^2y(t)}{\mathrm{d}t^2} = -\bar{\gamma}\frac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} + \xi(t), \tag{3.99}$$

这里，$\xi(t)$ 对应于白高斯噪声. 如果噪声 $\xi(t)$ 是非白的，那么粒子的运动由广义朗之万方程所描写：

$$m\frac{\mathrm{d}^2y(t)}{\mathrm{d}t^2} = -\bar{\gamma}\int_0^t \beta(t-t')\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t'}\mathrm{d}t' + \xi(t), \tag{3.100}$$

式中，$\beta(t)$ 是记忆核函数，满足涨落耗散定理 $\langle\xi(t)\xi(t')\rangle = k_\mathrm{B}T\bar{\gamma}\beta(t-t')$. 若 $\xi(t)$ 是分数阶高斯噪声，则广义朗之万方程可以变成分数阶朗之万方程：

$$\begin{aligned} m\frac{\mathrm{d}^2y(t)}{\mathrm{d}t^2} &= -\bar{\gamma}\int_0^t (t-t')^{2\bar{H}-2}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t'}\mathrm{d}t' + \eta\xi^{\bar{H}}(t) \\ &= -\bar{\gamma}\Gamma(2\bar{H}-1)\frac{\mathrm{d}^{2-2\bar{H}}}{\mathrm{d}t^{2-2\bar{H}}}y(t) + \eta\xi^{\bar{H}}(t), \end{aligned} \tag{3.101}$$

其中，$\bar{\gamma}$ 是广义阻尼系数，耦合常数 η 为

$$\eta = \sqrt{\frac{k_\mathrm{B}T\bar{\gamma}}{2D_H\bar{H}(2\bar{H}-1)}}. \tag{3.102}$$

后续的含时间分数阶导数的福克尔–普朗克方程可以从连续时间无规行走模型导出；分数阶朗之万方程可以从分数阶布朗运动模型推导.

第 4 章　非各态历经随机运动

本章导读：将各态历经条件系综平均是否等于时间平均，换成更容易判别的系统变量关联函数的长时行为. 进而将非各态历经运动分为两类: 弹道扩散和局域化. 给出产生非各态历经布朗运动的具体热色噪声，即简谐速度噪声.

所谓各态历经，是指在等能面上几乎所有的点都以下述方式运动：它能通过等能面上的每一个有限的小的区域. 玻尔兹曼创立了各态历经理论，要求随机变量的系综平均等于时间平均，目的是要借助于出现在相空间中流的类型来理解自然界中观测到的不可逆性的起源，是平衡态统计物理的基石. 各态历经性的被破坏是导致反常统计的充分条件，但不是必要条件.

如何确定一个体系或变量是否各态历经呢? 本章将讨论三种判据. 尤其重要的是，对于一个非马尔可夫动力学过程而言，当各态历经条件被破坏时，将会出现什么结果呢?

4.1　涨落耗散定理与扩散系数

描述涨落耗散动力学最常用的方法是广义朗之万方程 (GLE). 这一方程被用于研究多粒子体系的时间和频率依赖行为、正常和反常输运. Mori 和 Zwanzig 等最早利用投影算子方法推导得到 GLE，后来 Lee 利用递推关系方法亦推导出 GLE. 下面我们直接运用他们的结果，并对耦合引起的记忆阻尼核函数和噪声谱作一些讨论.

考虑质量为 M 的粒子在一维势 $U(x)$ 中运动，其与温度为 T 的热库线性耦合，其运动方程写作：

$$M\ddot{x}(t) + M\int_0^t \gamma(t-t')\dot{x}(t')\,\mathrm{d}t' + U'(x) = \xi(t), \tag{4.1}$$

式中，$\gamma(t)$ 是阻尼核函数，$\xi(t)$ 是随机力，假设与初始速度无关，其平均值为零且与 $\gamma(t)$ 满足第二涨落耗散定理 (FDT)

$$\langle \xi(t_1)\xi(t_2)\rangle = Mk_{\mathrm{B}}T\gamma(|t_1-t_2|), \tag{4.2}$$

其中, k_{B} 是玻尔兹曼常量，T 是温度.

记忆阻尼核函数的单边傅里叶变换为

$$\tilde{\gamma}(\omega) \equiv \tilde{\gamma}'(\omega) + \mathrm{i}\tilde{\gamma}''(\omega) = \int_0^{\infty} \gamma(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}t, \tag{4.3}$$

其实部和虚部满足 Kramers-Kronig 关系. 根据 Green-Kubo 公式得到频率阻尼函数 $\tilde{\gamma}(\omega)$ 与随机力的自相关函数 $\langle\xi(t)\xi(0)\rangle$ 的关系. 在缺乏势 $(U(x)=0)$ 的情况下，对方程 (4.1) 的速度解进行傅里叶变换，有

$$\int_0^{\infty} \langle v(t)v(0)\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}t = \frac{\langle v^2(0)\rangle}{\mathrm{i}\omega + \tilde{\gamma}(\omega)}, \tag{4.4}$$

设 $M\langle v^2(0)\rangle = k_{\mathrm{B}}T$，复数导纳或者迁移率 $\tilde{\mu}(\omega)$ 定义为

$$\tilde{\mu}(\omega) = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\int_0^{\infty} \langle v(t)v(0)\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}t, \tag{4.5}$$

频率有关的阻尼核函数 $\tilde{\gamma}(\omega)$ 为

$$M\tilde{\gamma}(\omega) = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\int_0^{\infty} \langle\xi(t)\xi(0)\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}t. \tag{4.6}$$

为了区分这两个关系式，(4.5) 式称为第一涨落耗散定理，表征粒子速度的弛豫；(4.6) 式称为第二涨落耗散定理，产生广义响应率，用来描述系统对热库自由度的响应. 对于随机过程而言，时间域的关联函数往往不易反映过程的特点，这就需要把噪声的时间关联函数通过傅里叶变换为在频率域描述的函数，进而得到功率谱密度

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle\xi(t)\xi(0)\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{d}t = 2\int_0^{\infty} \langle\xi(t)\xi(0)\rangle\cos(\omega t)\,\mathrm{d}t \\ &= 2Mk_{\mathrm{B}}T\tilde{\gamma}'(\omega). \end{aligned} \tag{4.7}$$

久保亮伍 (Kubo) 给出粒子扩散系数的定义式：

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t}\langle[x(t)-x(0)]^2\rangle, \tag{4.8}$$

式中，$\langle\cdots\rangle$ 表示对热平衡的系综平均. 把关系式 $x(t)-x(0) = \int_0^t v(t')\,\mathrm{d}t'$ 代入上式，得到扩散系数 D 的另外一种表达式

$$\begin{aligned} D &= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^t \mathrm{d}t_2 \langle v(t_1)v(t_2)\rangle \\ &= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t-t_1} \mathrm{d}t' \langle v(t_1)v(t_1+t')\rangle \\ &= \int_0^{\infty} \langle v(t)v(0)\rangle\,\mathrm{d}t, \end{aligned} \tag{4.9}$$

在推导过程中已假设

$$\lim_{t\to\infty}\langle v(t)v(0)\rangle = 0. \tag{4.10}$$

对无外势的广义朗之万方程 (4.1) 作系综平均，可以推导出速度自相关函数 $C_v(t)=\langle v(t)v(0)\rangle$ 的演化方程

$$\frac{\mathrm{d}C_v(t)}{\mathrm{d}t} = -\int_0^t \gamma(t-s)C_v(s)\,\mathrm{d}s, \tag{4.11}$$

利用拉普拉斯变换得到

$$\hat{C}_v(z) = \frac{C_v(0)}{z+\hat{\gamma}(z)}, \tag{4.12}$$

则扩散系数 D 为

$$D = \hat{C}_v(0) = \frac{C_v(0)}{\hat{\gamma}(0)}. \tag{4.13}$$

从上式可知，若 $C_v(0)$ 为有限值，则系统的扩散性质取决于马尔可夫零频阻尼 $\hat{\gamma}(0)=\displaystyle\int_0^\infty \gamma(t)\,\mathrm{d}t$. 通常用粒子的方均坐标描述扩散的快慢，$\langle [x(t)-\langle x(t)\rangle]^2\rangle \propto t^\alpha$，对于正常扩散系统 $(\alpha=1)$，$0<D<\infty$；欠扩散系统 $(0\leqslant\alpha<1)$，$D=0$；超扩散 $(1<\alpha\leqslant 2)$，$D=\infty$.

4.2 各态历经判据

各态历经假说最早由玻尔兹曼创立，表述为长时间后可观测量 A 的系综平均等于时间平均，即 $\langle A\rangle=\bar{A}$，保证随机动力学具有唯一渐进定态. 不过，各态历经假设在某些情形下并不成立，例如，莱维飞行的时间统计所控制的两个不同体系：纳米晶体量子点的荧光中断，冷原子亚反冲激光. 最近 Lutz(Lutz, 2004) 把幂律分布下的矩发散与各态历经破坏相联系. 讫今为止，大多数各态历经被破坏的例子皆是从一次矩和二次矩发散的观点来探讨的，这导致稳态分布的非唯一性. 本节我们对已有的几种各态历经判据进行比较，分析指出各种判据的不足之处.

4.2.1 Brinkhoff 判据

该判据表述为：如果一个随机变量 $A(t)$ 在长时间后，它的时间平均等于相平均，即

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} A(t)\,\mathrm{d}t = \langle A\rangle, \tag{4.14}$$

那么 $A(t)$ 是各态历经的. 然而，证明 (4.14) 式是否成立的困难在于需要求解运动方程来确定 $A(t)$ 的时间演化.

设系统由 N 个经典粒子组成，其运动状态用 Γ 相空间中的点表示，$\boldsymbol{x}(t)$ 代表 t 时刻系统的所有坐标和动量. 根据刘维尔定理，$\boldsymbol{x}(t)$ 的密度具有相空间测度不变性. 假定 $b[\boldsymbol{x}(t)]$ 是 Γ 空间的有限可积函数，则 Brikhoff 定理表述为

$$\bar{b}[\boldsymbol{x}(t_0)] = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{T+t_0} b[\boldsymbol{x}(t)]\,\mathrm{d}t, \tag{4.15}$$

其与初始值 t_0 无关. 如果相点的流具有度规传递性，那么时间平均是常量，且等于相空间平均. 如果 Γ 相空间的不变子空间不能被分解成两个测度为正的不变子空间，则称这个子空间具有度规传递性.

Brinkhoff 判据既适用于经典情况也适用于量子情况，但是这个表述过于数学化，很难从中直接辨明多体模型是否满足各态历经条件.

4.2.2 Khinchin 判据

Khinchin 方法是对量子多体模型的关联函数取时间平均，一个变量是否是各态历经性的，由它的自相关函数来判断. 关联函数可以用来描述动力学过程，而这个量能够通过非弹性散射进行测量. 定义一个相函数 $f(p)$ 的关联函数

$$R(u) = \frac{1}{Df}\langle f(p,t)f(p,t+u)\rangle, \tag{4.16}$$

其中，$Df = \langle f(p)\rangle_{\mathrm{st}}$. 若 $u\to\infty$，$R(u)\to 0$，则相函数 $f(p)$ 是各态历经的.

Khinchin 判据还可以表述为：对于一个经典系统，如果一个动力学变量 A 的自相关函数满足

$$\lim_{t\to\infty}\langle A(t)A(0)\rangle = \langle A(0)\rangle\langle A(0)\rangle, \tag{4.17}$$

则 A 是各态历经变量.

单个自由粒子的广义朗之万方程写作

$$\dot{p}(t) = -\int_0^t \gamma(t-t')p(t')\,\mathrm{d}t' + \xi(t), \tag{4.18}$$

其中，$\gamma(t)$ 是阻尼核函数，$\xi(t)$ 是随机力，满足 $\langle\xi(t)\rangle = 0$，$\langle\xi(t)p(0)\rangle = 0$，且有 $\langle\xi(t)\xi(t')\rangle = \langle p^2\rangle_{\mathrm{eq}}\gamma(t-t')$. 方程 (4.18) 乘以 $p(0)$，并作系综平均，得到

$$\dot{R}(t) = -\int_0^t \gamma(t-t')R(t')\,\mathrm{d}t'. \tag{4.19}$$

式中，$R(t)$ 表示粒子动量的弛豫函数，$R(t) = C_p(t)/C_p(0)$，$C_p(t)$ 为 p 的自相关函数，$C_p(t) = \langle p(t)p(0)\rangle - \langle p(t)\rangle\langle p(0)\rangle$. $R(t)$ 的拉普拉斯变换形式为 $\hat{R}(z) = 1/[z+\hat{\gamma}(z)]$，引入响应函数 $\chi(t) = -\dot{R}(t)$，有 $\hat{\chi}(z) = -z\hat{R}(z) + R(0)$.

根据线性响应理论，各态历经条件等价于如下形式

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T\int_0^t\chi(t,t')\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{d}t=\chi_{\mathrm{s}}. \tag{4.20}$$

χ_{s} 是与时间无关的值，称为静态响应率，$\chi_{\mathrm{s}}=R(0)$. 假设系统处于稳态，则对 $t>t'$，有 $\chi(t,t')=\chi(t-t')$. 把响应函数 $\chi(t)=-\mathrm{d}R(t)/\mathrm{d}t$ 代入 (4.20) 式，得到

$$\begin{aligned}&\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T[R(0)-R(t)]\,\mathrm{d}t\\&=\lim_{T\to\infty}\left[R(0)-\frac{1}{T}\int_0^T R(t)\,\mathrm{d}t\right]\\&=\lim_{T\to\infty}\left[\int_0^T\chi(t')\,\mathrm{d}t'+R(T)-\frac{1}{T}\int_0^T R(t)\,\mathrm{d}t\right].\end{aligned} \tag{4.21}$$

上式中已利用 $\int_0^T\chi(t')\,\mathrm{d}t'=-\int_0^T\mathrm{d}R(t')=-R(T)+R(0)$. 若 $R(t)$ 是实值函数，则根据广义终值定理

$$\lim_{z\to0}z\hat{R}(z)=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T R(t)\,\mathrm{d}t, \tag{4.22}$$

得到

$$\hat{\chi}(0)+R(T\to\infty)-\lim_{z\to0}z\hat{R}(z)=\chi_{\mathrm{s}}. \tag{4.23}$$

另外，对 $\chi(t)=-\mathrm{d}R(t)/\mathrm{d}t$ 进行拉普拉斯变换

$$\hat{\chi}(z)=-z\hat{R}(z)+R(0)=-z\hat{R}(z)+\chi_{\mathrm{s}}, \tag{4.24}$$

对上式取极限 $z\to0$

$$\hat{\chi}(0)+\lim_{z\to0}z\hat{R}(z)=\chi_{\mathrm{s}}. \tag{4.25}$$

比较方程 (4.23) 和 (4.25)，可知各态历经成立的条件是 $R(T\to\infty)=0$. 此情形下，根据终值定理

$$\lim_{z\to0}z\hat{R}(z)=\lim_{t\to\infty}R(t)=0, \tag{4.26}$$

代入方程 (4.25)，有

$$\hat{\chi}(0)=\chi_{\mathrm{s}}. \tag{4.27}$$

这也是不可逆条件的结果. 因此，对于广义朗之万方程描述的扩散过程，不可逆性是各态历经假设成立的充分必要条件.

应该指出的是对于 Khinchin 判据而言，多数情况下很难求出变量的自相关函数，另外，它不能区分不同类型的非各态历经系统.

4.2.3 Lee 判据

Khinchin 定理提出以后，对于不可逆和各态历经的关系，Kubo 认为反过来亦成立．然而，Lee 认为不可逆性不是各态历经的充分必要条件；另外，各态历经假说最初是在经典多体问题的统计力学中形成的，而对其有效性的研究仅限于经典范畴．Lee 提出一个适用于经典和量子两种情况的新判据：动力学变量 A 是各态历经的充分必要条件是自相关函数的积分在时间趋于无穷时为一非零常量，即

$$0 < W = \int_0^\infty \frac{(A(t), A(0))}{(A(0)A(0))}\,\mathrm{d}t < \infty. \tag{4.28}$$

对于量子系统，$(A,B) = \beta^{-1}\int_0^\beta \langle \mathrm{e}^{\lambda H} A \mathrm{e}^{-\lambda H} B\rangle\,\mathrm{d}\lambda - \langle A\rangle\langle B\rangle$，$\beta$ 是温度的倒数；对于经典系统 $(\beta\to 0)$，$(A,B) = \langle AB\rangle$．如果 $W=0$ 或 ∞，则 A 是非各态历经变量，分别对应于局域化和弹道扩散．

方程 (4.14) 中各态历经假设不再是抽象的表述，而是物理上能实现的，其可以通过外部探针进行测量，例如，X 射线、热中子等．方程 (4.14) 两端可以看成是来源于处于热平衡态的同一宏观个体中的两个独立散射过程，非弹性散射和弹性散射．外部探针的非弹性散射引起方程 (4.14) 中左边出现时间演化过程，宏观各态受到时间依赖方式的扰动．方程 (4.14) 的右边表示同一个体受到的扰动与时间无关，对应于线性响应理论描述的多体系统的散射过程．在此基础上，Lee 重新表述 (4.14) 式，从而能够进行物理测量．

假设一个系统的厄米哈密顿量为 $H(A)$，在 $t=-T$，$T\to\infty$ 时被放置在弱的外部势场 $h(t)$ 中，则在 t 时刻系统的总能量为

$$H'(t) = H(A) + h(t)A, \tag{4.29}$$

其中，A 为系统的动力学变量．根据线性响应理论，$T\to\infty$ 时，有

$$\langle A(t)\rangle_{H'(t)} = \langle A(t)\rangle_H + \int_{-T}^{t} h(t')\chi_{_A}(t-t')\,\mathrm{d}t', \tag{4.30}$$

式中，$\chi_{_A}(t-t')$ 是平稳因果响应函数，依赖于 H 而与 H' 无关．$\langle\cdots\rangle_{H'}$ 和 $\langle\cdots\rangle_H$ 分别表示用 H' 和 H 的密度矩阵作系综平均，$\langle A(t)\rangle_{H'(t)} = \mathrm{Tr}A\rho(t)$，$\rho(t)$ 是 $H'(t)$ 的密度矩阵．注意对厄米系统，有 $\langle A(t)\rangle_H = \langle A\rangle_H$，则方程 (4.14) 左边的时间平均写作

$$I_{TA} = \langle A\rangle_H + \lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\int_{-T}^{t} h(t')\chi_{_A}(t-t')\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{d}t. \tag{4.31}$$

如果外场 $h(t)$ 可任意选取，那么对于所有的时间 t，能够选取 $h(t)$ 为常量 h_1．如果同样的系统 $H(A)$ 被放置在常量外势场 $h=h_1$，总能量为 $H' = H(A) + h_1 A$，则

方程 (4.14) 右边的 $\langle A(t)\rangle \to \langle A(t')\rangle_{H'} = \mathrm{Tr}A\rho$，$\rho$ 是 H' 的密度矩阵. 同样根据线性响应理论，有

$$\langle A\rangle_{H'} = \langle A\rangle_H + h_1\chi_{_A}, \tag{4.32}$$

式中，$\chi_{_A}$ 是 A 的静态响应函数. 把方程 (4.30) 代入 (4.14) 式左边，并把 (4.32) 式代入 (4.14) 式右边，则获得

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T}\int_{-T}^{t}\chi_{_A}(t-t')\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{d}t = \chi_{_A}. \tag{4.33}$$

如果线性响应理论成立，那么方程 (4.14) 等同于方程 (4.33). Lee 已证明，若 (4.33) 式成立，则必然有 (4.28) 式成立.

Lee 在几篇文章 (Lee, 2001; 2007) 中给出了几个各态历经被破坏且能精确求解的模型.

1. 固定边界条件下的简谐振子链

考虑处于热平衡态的 $2N$ 个简谐振子链耦合以后，耦合系数为 k，$\{p_j, x_j\}$ 表示质量为 m_j 的第 j 个振子的动量和坐标，$j=(-N,N)$. 假定对于 $j=(0,N)$，$m_j = m < \infty$，而对于 $j=(-N,-1)$，有 $m_j\to\infty$，这相当于简谐链的一端在 $j=-1$ 处被固定，而另一端自由. 选取零位置处振子的动量为研究对象，$A=p_{_0}$，并在零位置处施加一个扰动，从而引起 $p_{_0}$ 随时间演化. 当 $N\to\infty$ 时，$p_{_0}$ 的自相关函数为

$$r_A(t) = \mathrm{J}_0(ut) - \mathrm{J}_4(ut), \tag{4.34}$$

其中，$u = 2\sqrt{k/m}$，J_n 是 n 阶贝塞尔函数. 根据贝塞尔函数的积分性质

$$\int_0^\infty \mathrm{J}_n(ut)\,\mathrm{d}t = \frac{1}{u}, \tag{4.35}$$

可知 $W=0$，则 A 是一个非各态历经变量.

为何会出现非各态历经现象? 振子在零处 (或者与固定端为有限距离处) 受到扰动，在整个链中形成驻波，扰动能量不能扩展到链中驻波的节点处，即不能扩展到整个空间. 这就表明此链不具有度规传递性. 如果驻波转变为行波，简谐链重新具备这种传递性，即考虑对于 $j=(-N,N)$，$m_j=m$，则

$$r_A = \mathrm{J}_0(ut), \quad W = \frac{1}{u}. \tag{4.36}$$

此情形下扰动能量扩展到整个空间，那么 A 就是一个各态历经变量.

2. 贝特晶格上的简谐振子链

在贝特 (Bethe) 晶格的每个顶点上放置一个单原子振子，如图 4.1 所示，贝特晶格的坐标数为 q，$q=3,4,\cdots$. 选取 $A=p_0$ 为 0 点处的动量，若贝特晶格无限扩展，则有

$$r_A(t)=\frac{c^2}{2\pi}\int_a^b \sin(\omega t)\sqrt{(b^2-\omega^2)(\omega^2-a^2)}/\omega(c^2-\omega^2)\,\mathrm{d}\omega, \tag{4.37}$$

式中，$a=\sqrt{q-1}-1$，$b=\sqrt{q-1}+1$，$c=\sqrt{2q}$，它们之间存在关系 $a<b<c$，$a^2+b^2=c^2$. 那么

$$W=\int_0^\infty r_A(t)\,\mathrm{d}t=0. \tag{4.38}$$

在无限贝特晶格中存在行波，但是微扰能量不能完全扩展. 能量依次从一个顶点传到另一个顶点，有 $q-1$ 种方式分离，最终达到一组测度为零的态. 粒子动量的自相关函数在长时极限下为长拖尾关联

$$\lim_{t\to\infty} r_A(t)\propto t^{-\frac{3}{2}}, \tag{4.39}$$

相应的扩散系数 $D=0$.

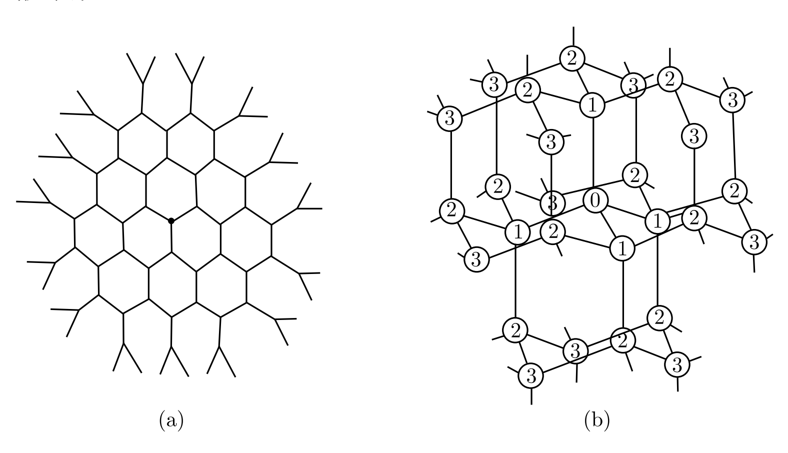


图 4.1

(a) 石墨的簇 -Bethe 格子 ($q=3$)；(b) 金刚石结构的 Bethe 晶格 ($q=4$)

4.2.4 内在判据和外在表现

Bao 和 Hänggi 等发现对于弹道扩散和局域化两种系统，它们的外在表现分别为：长时间以后，系统的渐进分布依赖于粒子的速度或坐标的初始准备. 若阻尼核函数的拉普拉斯变换满足下面两个条件：

$$\lim_{z\to 0} z^{-1}\hat{\gamma}(z)\to\infty, \quad \lim_{z\to 0} z\hat{\gamma}(z)=0. \tag{4.40}$$

则系统的渐进态为平衡态，即粒子的坐标和速度都是各态历经变量. 这里，各态历经被破坏的内在原因在于：记忆阻尼核函数的拉普拉斯变换在低频时正比或反比于频率.

那么如何确定一个广义布朗运动的变量是否是各态历经的？本章第 6 节将以一个新的视角对 Khinchin 判据、Lee 判据以及内在判据和外在表现进行探讨.

4.3 牛顿和朗之万之间的动力学

非马尔可夫布朗动力学经常用广义朗之万方程来描写

$$m\dot{v}(t) + m\int_0^t \gamma(t-t')v(t')\mathrm{d}t' + U'(x) = \varepsilon(t), \tag{4.41}$$

式中，噪声 $\varepsilon(t)$ 被假设与粒子初始速度无关，即 $\langle v(0)\varepsilon(t)\rangle = 0$，它的平均值为零，$\langle\varepsilon(t)\rangle = 0$, 噪声关联函数与阻尼核函数 $\gamma(t)$ 之间满足涨落耗散定理：$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle = mk_{\mathrm{B}}T\gamma(t-t')$.

现考虑一个常量力情况，即 $U(x) = -Fx$，方程 (4.41) 的形式解为

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) + v(0)H(t) + \frac{1}{m}\int_0^t \mathrm{d}t' H(t-t')[\varepsilon(t') + F], \\ v(t) &= v(0)h(t) + \frac{1}{m}\int_0^t \mathrm{d}t' h(t-t')[\varepsilon(t') + F], \end{aligned} \tag{4.42}$$

其中，$H(0) = 0$，$h(0) = 1$. 两个响应函数 $H(t)$ 和 $h(t)$ 分别是 $\hat{H}(s) = [s^2 + s\hat{\gamma}(s)]^{-1}$ 和 $\hat{h}(s) = [s + \hat{\gamma}(s)]^{-1}$ 的逆拉普拉斯变换，这里 $\hat{\gamma}(s)$ 为阻尼核 $\gamma(t)$ 的拉普拉斯变换，$\hat{\gamma}(s) = \displaystyle\int_0^\infty \gamma(t)\exp(-st)\mathrm{d}t$.

假设特性方程 $s + \hat{\gamma}(s) = 0$ 有一零根，$s = 0$，则根据留数定理知

$$h(t) = b + \sum_i \mathrm{res}[\hat{h}(s_i)]\exp(s_i t), \quad H(t) = c + bt + \sum_i s_i^{-1}\mathrm{res}[\hat{h}(s_i)]\exp(s_i t). \tag{4.43}$$

这里，s_i ($\mathrm{Re}s_i < 0$) 代表以上特性方程的非零根，$\mathrm{res}[\cdots]$ 代表留数. 出现在 (4.43) 式中的两个常量由下式定出：

$$b = \frac{1}{\hat{\gamma}'(0)}, \quad c = -\frac{1}{2}b^2\hat{\gamma}''(0). \tag{4.44}$$

若它们不为零，则需 $\hat{\gamma}(0) = \displaystyle\int_0^\infty \gamma(t)\mathrm{d}t = 0$，此即意味着系统的有效马尔可夫摩擦为零.

在常量力作用下，粒子的平均速度和位移在长时间后的渐进表示式为

$$\{\langle v(t\to\infty)\rangle\}=b\left(\{v(0)\}+\frac{F}{m}t\right)+\frac{F}{m}c, \tag{4.45}$$

$$\begin{aligned}\{\langle x(t\to\infty)\rangle\}=&\{x(0)\}+b\left(\{v(0)\}t+\frac{1}{2}\frac{F}{m}t^2\right)\\&+c\left(\{v(0)\}+\frac{F}{m}t\right)+\frac{F}{m}d,\end{aligned} \tag{4.46}$$

其中，$d=-\sum_i \mathrm{res}[\hat{h}(s_i)]/s_i^2$ 为一个噪声相关的量，$\{\cdots\}$ 代表对初始分布求平均，$\langle\cdots\rangle$ 表示对噪声求平均.

故一个质量为 m 的布朗粒子在常量力 F 作用下的耗散加速度为

$$a=\lim_{t\to\infty}\frac{\langle v(t)\rangle}{t}=\frac{F}{m}b, \tag{4.47}$$

其中，b 被称作耗散折合因子，取值范围是 $0\leqslant b\leqslant 1$. 表明随着 b 值的增加，系统的耗散性降低. 方程 (4.47) 可视作一个介于牛顿力学 ($b=1$) 和朗之万力学 ($b=0$) 之间的结果.

讨论

动力学的两个极限结果为：① 牛顿力学：$b=1$，意味着无耗散，$\gamma(t)\equiv 0$，则 $c=d=0$ 得出 $a=F/m$、$v(t)=v(0)+\dfrac{F}{m}t$ 和 $x(t)=x(0)+v(0)t+\dfrac{1}{2}\dfrac{F}{m}t^2$；② 对通常的具有有限马尔可夫摩擦 ($\hat{\gamma}(0)\neq 0$) 的朗之万力学而言，$b=0$，这时 $c=\hat{\gamma}^{-1}(0)$，则 $a=0$、$\langle v(t\to\infty)\rangle=F/[m\hat{\gamma}(0)]$和 $\{\langle x(t\to\infty)\rangle\}=\{x(0)\}+\{v(0)\}/\hat{\gamma}(0)+\dfrac{F}{m}t/\hat{\gamma}(0)+\dfrac{F}{m}d$.

4.4 弹 道 扩 散

在力自由 ($F=0$) 情况下，我们从方程 (4.42) 出发，得出粒子速度关联函数：

$$\{\langle v(t_1)v(t_2)\rangle\}=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}h(|t_1-t_2|)+\left(\{v^2(0)\}-\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)h(t_1)h(t_2), \tag{4.48}$$

长时间后，粒子速度的前两次矩为

$$\langle v(t\to\infty)\rangle=bv(0),\quad \{\langle v^2(t\to\infty)\rangle\}=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}+b^2\left[\{v^2(0)\}-\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right]. \tag{4.49}$$

可见，若 $b\neq 0$，粒子速度的稳定分布将依赖于它的初始准备，这是一种非各态历经的表现. 当然，如果假设粒子初始速度处于热平衡，即 $\{v(0)\}=0$ 和 $\{v^2(0)\}=$

$k_{\mathrm{B}}T/m$，那么粒子速度关联函数在任何时刻均保持时间平移不变性，为一个均匀过程；同时，粒子速度在这个特殊初始条件下能达到平衡.

自由粒子的方均位移为

$$\begin{aligned}\{\langle x^2(t)\rangle\} =& \{x^2(0)\} + \{v^2(0)\}H^2(t) + 2\{x(0)v(0)\}H(t)\\ &+\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\left(2\int_0^t \mathrm{d}t' H(t') - H^2(t)\right).\end{aligned} \tag{4.50}$$

由方程 (4.43)，知

$$H(t\to\infty) = c + bt, \tag{4.51}$$

那么

$$\begin{aligned}\langle x^2(t\to\infty)\rangle =& \{x^2(0)\} + \{v^2(0)\}(c+bt)^2 + 2\{x(0)v(0)\}(c+bt)\\ &+\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\left[2ct + bt^2 - (c+bt)^2\right].\end{aligned} \tag{4.52}$$

故若 $b\neq 0$，则粒子的渐进方均位移与 t^2 成正比，即为弹道扩散，这是无势情况下热扩散的极限情况. 图 4.2 绘出了简谐速度噪声诱发的弹道扩散.

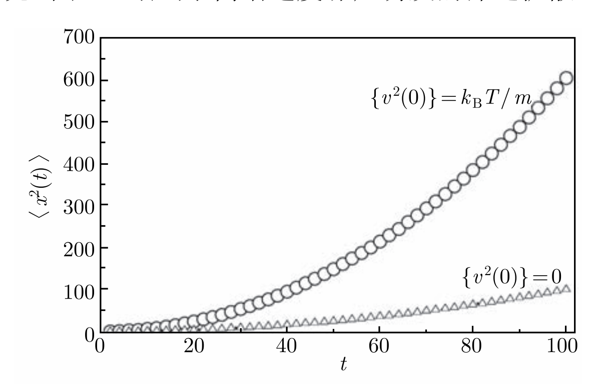


图 4.2　简谐速度噪声诱发的弹道扩散，图中选两种粒子初始速度的二次矩，可见对粒子方均位移影响很大

产生弹道扩散的条件是

$$\int_0^\infty \gamma(t)\mathrm{d}t = 0, \quad \hat{\gamma}(0) = \lim_{s\to 0}\hat{\gamma}(s)/s < \infty. \tag{4.53}$$

推广的爱因斯坦关系写作

$$\frac{\kappa_2}{\mu_2(F\to 0)} = k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{eff}}. \tag{4.54}$$

这里，κ_2 称为弹道扩散系数，μ_2 为迁移率，它们分别定义为

$$\kappa_2 = \lim_{t\to\infty}\frac{\{\langle x^2(t)\rangle\}_{F=0}}{2t^2}, \quad \mu_2(F\to 0) = \lim_{t\to\infty}\left.\frac{\{\langle x(t)\rangle\}}{Ft^2}\right|_{F=0}, \tag{4.55}$$

(4.54) 式中有效温度定义为

$$T_{\text{eff}} := T + b[m\{v^2(0)\}/k_{\text{B}} - T]. \tag{4.56}$$

例 4.1 热宽带色噪声诱发弹道扩散

解: 描写粒子运动的广义朗之万方程写作

$$m\ddot{x}(t) + m\int_0^t \eta(t-t')\dot{x}(t')\mathrm{d}t' = \varepsilon(t) \tag{4.57}$$

式中，噪声与阻尼核函数之间满足涨落耗散定理 $\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle = k_{\text{B}}T\eta(t-t')$，$T$ 是温度.

作为一个实际例子，我们提出一个“宽带”色噪声，即它的谱密度函数在低频和高频两端均消失，噪声关联函数为

$$\eta(t-t') = A\left[\frac{1}{\tau_2}\exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau_2}\right) - \frac{1}{\tau_1}\exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau_1}\right)\right], \tag{4.58}$$

式中，$A = \eta_0\tau_1^2/(\tau_1^2 - \tau_2^2)$，$\tau_1$ 和 τ_2 是两个时间常量，η_0 为马尔可夫摩擦强度. 不难看出，当 $\tau_1 \to \infty$，上式退化为 OU“红”噪声的关联函数；而当 $\tau_2 = 0$，上式右边第一项成为一个 δ 函数，以致于噪声变为“绿”噪声. 该噪声可以用两个 OU 红色噪声之差来产生，它们是同一个白噪声源但具有不同的噪声关联时间.

噪声的谱密度函数定义为噪声关联函数傅里叶变换的实部，结果为

$$S_\varepsilon = k_{\text{B}}T\frac{2\eta_0\tau_1^2\omega^2}{(1+\tau_1^2\omega^2)(1+\tau_2^2\omega^2)}, \tag{4.59}$$

该噪声之所以称为“带通”色噪声是因为在高低频处谱密度等于零.

基于拉普拉斯变换，我们给出广义朗之万方程 (4.57) 连同 (4.58) 式的解：

$$x(t) = x(0) + v(0)H(t) + \int_0^t H(t-t')\varepsilon(t')\mathrm{d}t', \tag{4.60}$$

式中，$x(0)$ 和 $v(0)$ 分别是粒子的初始坐标和速度，响应函数 $H(t)$ 是 $\hat{H}(s) = [s^2 + s\hat{\eta}(s)]^{-1}$ 的逆拉普拉斯变换，这里 $\hat{\eta}(s) = \int_0^\infty \eta(t)\exp(-st)\mathrm{d}t$ 为阻尼核函数的拉氏变换，所以

$$\hat{H}(s) = \frac{(1+s\tau_1)(1+s\tau_2)}{s^2\{\eta_0\tau_1^2/(\tau_1+\tau_2) + (1+s\tau_1)(1+s\tau_2)\}}. \tag{4.61}$$

应用留数定理，我们就可以得到 $H(t)$ 的表示式，从而给出粒子位移平方的平均：

$$\begin{aligned}\langle x^2(t)\rangle = \frac{k_{\text{B}}T}{m}\Bigg\{&D_N 2t + D_S t^2 - \frac{a^2(\tau_1+\tau_2)^2}{(1+a)^4} + 2\int_0^t \varXi(t')\mathrm{d}t' \\ &-\varXi^2(t) - 2\left[\frac{t}{1+a} + \frac{a(\tau_1+\tau_2)}{(1+a)^2}\right]\varXi(t)\Bigg\},\end{aligned} \tag{4.62}$$

其中，$D_N=(\tau_1+\tau_2)a^2/(1+a)^3$，$D_S=a/(1+a)^2$，$a=\eta_0\tau_1^2/(\tau_1+\tau_2)$，时间衰减函数为

$$\begin{aligned}\varXi(t)=&\frac{1}{\tau_1\tau_2(\nu_1-\nu_2)}\left[\frac{(1+\nu_1\tau_1)(1+\nu_1\tau_2)}{\nu_1^2}\exp(\nu_1 t)\right.\\&\left.-\frac{(1+\nu_2\tau_1)(1+\nu_2\tau_2)}{\nu_2^2}\exp(\nu_2 t)\right],\end{aligned}\tag{4.63}$$

式中，ν_1 和 ν_2 为方程 $s^2+(\tau_1+\tau_2)(\tau_1\tau_2)^{-1}s+(1+a)(\tau_1\tau_2)^{-1}=0$ 的两个根.

讨论

当 $\tau_1\to\infty$，$D_S=0$，不存在弹道扩散. 弹道扩散是热扩散的极限，产生的原因在于内部色噪声谱在零频等于零，导致有效阻尼等于零，即 $\lim\limits_{t\to\infty}\int_0^t\eta(t-t')\mathrm{d}t'=0$.

例 4.2　单电子原子与辐射场的相互作用

解：考虑一个单电子原子在一个辐射场中的运动，在偶极近似下，系统加环境的总哈密顿量写作

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+U(\boldsymbol{r})+\sum_{\boldsymbol{k},s}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left(a_{\boldsymbol{k},s}^+a_{\boldsymbol{k},s}+\frac{1}{2}\right),\tag{4.64}$$

其中，失势为

$$\boldsymbol{A}=\sum_{\boldsymbol{k},s}\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\boldsymbol{k}}V}\right)^{1/2}f_{\boldsymbol{k}}\hat{e}_{\boldsymbol{k},s}(a_{\boldsymbol{k},s}+a_{\boldsymbol{k},s}^+),\tag{4.65}$$

这里，$f_{\boldsymbol{k}}$ 为电子的形式因子，$f_{\boldsymbol{k}}^2=\varOmega^2/(\omega^2+\varOmega^2)$，$\varOmega$ 是一个高频截断频率，$\hat{e}_{\boldsymbol{k},s}$ 为一个极化矢量，V 为体积.

在大辐射空腔极限下，求和变积分 $\sum\limits_{\boldsymbol{k}}\longrightarrow V(2\pi)^{-3}\int\mathrm{d}\boldsymbol{k}$，那么谱密度为

$$\tilde{\gamma}=\frac{\mathrm{e}^2}{6\pi m}\int\mathrm{d}\boldsymbol{k}f_{\boldsymbol{k}}^2\delta(\omega-\omega_{\boldsymbol{k}})=\frac{2\mathrm{e}^2\omega^2}{3c^3m}f_{\boldsymbol{k}}^2.\tag{4.66}$$

可见其在低频区域正比于频率的平方. 这种频谱所对应的噪声关联函数或阻尼核函数是其逆傅里叶变换

$$\gamma(t)=\gamma_0[\delta(t)-\varOmega\exp(-\varOmega t)],\tag{4.67}$$

其中，$\gamma_0=2e^2\varOmega^2/(3c^3m)$. 此情况下，阻尼核函数的拉普拉斯变换为

$$\hat{\gamma}(z)=\frac{\gamma_0 z}{z+\varOmega}.\tag{4.68}$$

满足第一类非各态历经非马尔可夫过程的条件，会产生弹道扩散和耗散加速度. 耗散折合因子为

$$b=\frac{1}{1+\gamma_0/\varOmega}.\tag{4.69}$$

这里的色噪声的关联函数为白噪声的 δ 关联函数与 OU 色噪声 (红噪声) 的指数衰减型关联函数的差，其谱与红噪声的互补，具有绿噪声特征，但需注意该噪声并不能用两个噪声之差来产生.

小结

久保第二涨落耗散定理仍然成立的条件下，广义朗之万方程描写的布朗运动的各态历经性可能被破坏. 若系统长时间分布依赖于其初始速度准备，则被归结为*第一类非各态历经运动*. 结果导致粒子方均位移与时间的平方成正比，常量力场下布朗粒子存在弹道扩散和一个耗散加速度. 产生这种运动的条件是系统的阻尼核函数的拉普拉斯变换在零频等于零，$\hat{\gamma}(0)=0$ 并且 $\lim_{s\to 0}\hat{\gamma}(s)/s$ 的值有限，即在低频下 $\hat{\gamma}(s)$ 应正比于 s. 另外，

$$\tilde{\gamma}(\omega)=\hat{\gamma}(s=-\mathrm{i}\omega).$$

按照涨落耗散定理知 $\mathrm{Re}[\tilde{\gamma}(\omega)]$ 就是噪声的谱密度，这意味着诱发弹道扩散的热色噪声的谱在低频应正比于频率的平方. 这能在声子模型、电磁场中的涡旋扩散、速度相关的耦合中发现，而后者的实例有超导量子相干、黑体电磁场等.

4.5　局　域　化

4.5.1　阻尼陷阱

考虑一个非马尔可夫自由布朗粒子的运动，广义朗之万方程为

$$\dot{Q}=P(t)/M,\quad \dot{P}+\int_0^t R(t-t')P(t')\mathrm{d}t'=\varepsilon(t), \tag{4.70}$$

其中，噪声的关联函数与阻尼核满足涨落耗散定理：$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle=k_{\mathrm{B}}TR(t-t')$.

用拉普拉斯变换方法，可以获得粒子坐标的解，然后求出它的关联函数：

$$\begin{aligned}\{\langle Q(t+\tau)Q(t)\rangle\}=&\{Q^2(0)\}+\{Q(0)P(0)\}[\varPsi(t+\tau)+\varPsi(t)]\\&+(\{P^2(0)\}-Mk_{\mathrm{B}}T)\varPsi(t+\tau)\varPsi(t)\\&+Mk_{\mathrm{B}}T\left(2\int_0^t\varPsi(t')\mathrm{d}t'+\int_0^\tau\mathrm{d}t'[\varPsi(t+t')-\varPsi(t')]\right).\end{aligned} \tag{4.71}$$

其中，$\varPsi(t)=L^{-1}\hat{\varPsi}(z)$，$\hat{\varPsi}(z)=[z+z\hat{R}(z)]^{-1}$. 如果 $\hat{R}(0)=\infty$ 和 $\lim_{z\to 0}z\hat{R}(z)=\varpi^2\neq 0$，那么

$$\lim_{t,\tau\to\infty}\{\langle Q(t+\tau)Q(t)\rangle\}=\{Q^2(0)\}+k_{\mathrm{B}}T/(M\varpi^2). \tag{4.72}$$

按照 Khinchin 定理，粒子的坐标变量不是一个各态历经变量. 特别注意到

$$\{\langle Q^2(\infty)\rangle\} = \{Q^2(0)\} + \frac{2k_{\mathrm{B}}T}{M\varpi^2}. \tag{4.73}$$

这显示自由粒子的方均位移为一个不随时间而增长的常量，则粒子扩散系数等于零. 产生局域化的条件是

$$R(\infty) \neq 0, \quad \lim_{z\to 0} z\hat{R}(z) \neq 0. \tag{4.74}$$

这种系统稳定态依赖于它的初始坐标准备的运动称为*第二类非各态历经运动*. 直观的物理理解是强摩擦形成了一个在粒子初始位置处的阻尼陷阱.

4.5.2 气体分子与固体表面相互作用

经常用来研究气体分子与固体表面相互作用的一个很好的模型是耦合振子链，参见图 4.3. 其哈密顿量写作

$$\begin{aligned} H = & \frac{p_0^2}{2M} + U(x_0) + \frac{1}{2}M\omega^2(x_0 - x_1)^2 \\ & + \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x_{j+1} - x_j)^2\right], \end{aligned} \tag{4.75}$$

其中，x_0 代表气体分子的坐标，其与振子链中第一个原子 x_1 相互作用；半无界或周期边界的振子链仅存在最近邻的线性相互作用，其可视为气体分子的热库.

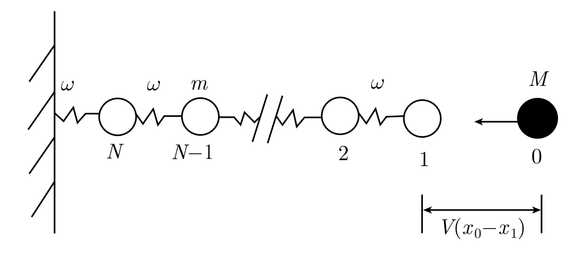


图 4.3 固定边界条件下的耦合振子链

如果耦合振子的另一端固定，$x_{N+1} = 0$，由正则方程可导出气体粒子遵守的广义朗之万方程：

$$\ddot{x}(t) = -U'(x) - \Omega^2 x(t) - \int_0^t \gamma(t-t')\dot{x}(t')\mathrm{d}t' + \xi(t), \tag{4.76}$$

这里的 $x(t)$ 就是 $x_0(t)$, 我们略去了下脚标 “0”，方程中的一些量为

$$\Omega=\frac{\omega^2}{N+1},$$
$$\gamma(t)=\frac{2\omega^2}{N+1}\sum_{j=1}^{N}\cos^2\left(\frac{\pi j}{2(N+1)}\right)\cos(\omega_j t),$$
$$\xi(t)=\sum_{j=1}^{N}\Gamma_j\left[x_j(0)-\frac{\Gamma_j}{\omega_j^2}x_0(0)\cos(\omega_j t)+\frac{\dot{x}_j(0)}{\omega_j}\sin(\omega_j t)\right], \tag{4.77}$$

式中，

$$\Gamma_j=\sqrt{\frac{2}{N+1}}\omega^2\sin\left(\frac{\pi j}{N+1}\right),\quad \omega_j=2\omega\sin\left[\frac{\pi j}{2(N+1)}\right].$$

在热力学极限 $N\to\infty$ 下，方程 (4.77) 中的求和变积分，则得到阻尼核函数的显式：

$$\begin{aligned}\gamma(t)&=\frac{4}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\cos^2\theta\cos(2\omega t\sin\theta)\mathrm{d}\theta\\&=\omega^2[\mathrm{J}_0(2\omega t)+\mathrm{J}_2(2\omega t)]=\frac{\omega^2\mathrm{J}_1(2\omega t)}{t},\end{aligned} \tag{4.78}$$

其中，$\mathrm{J}_n(n=0,1,2)$ 是贝赛尔函数.

可见，长时间后此阻尼函数的值发散，满足非各态历经条件 (4.74) 式. 故与耦合振子链一端相互作用的气体分子经历第二类非各态历经运动，其坐标是一个非各态历经变量.

4.6　外场下的两类非各态历经运动

为了方便研究一个非各态历经性系统在非线性势中的特性，我们需要知道一个较为简单的热噪声源，用在广义朗之万方程之中. 为此目的，本节给出一个诱发弹道扩散的色噪声产生方案，即简谐速度噪声 (HVN). ① 用 HVN 去驱动一个广义朗之万方程，自由粒子的坐标显示弹道扩散；② 将弹道扩散粒子的速度在长时间的解作为一个噪声项，将导致广义布朗运动的局域化.

4.6.1　简谐速度噪声

谐振子无论在经典、量子力学中，还是在统计物理中，都是一个重要的基础性模型. 任何一个偏离而又接近平衡态的稳定系统，都可以用谐振子加以描述. 在随机动力学中，有一个常用的准单色噪声：简谐噪声，它是用一个高斯白噪声驱动一个阻尼谐振子的坐标而生成的，但是很少把它的速度项作为一个噪声源，后者可称为简谐速度噪声. 研究表明：简谐速度噪声的谱与简谐噪声的谱有很大不同，因此将引起新现象.

1. 模型

当一个 RLC 串联电路两端有噪声电压 $\eta(t)$ 扰动时，就会在电容两端产生一个简谐噪声电压. 按照基尔霍夫电压定律，电路的方程为

$$LC\frac{\mathrm{d}^2\varepsilon(t)}{\mathrm{d}t^2}+RC\frac{\mathrm{d}\varepsilon(t)}{\mathrm{d}t}+\varepsilon(t)=\eta(t) \tag{4.79}$$

左边第一项为电感 L 上的电压，第二项为电阻 R 上的电压，$\varepsilon(t)$ 是电容电压，等式右边 $\eta(t)$ 为输入电压扰动，电路中的电流为 $i(t)=C\dot{\varepsilon}(t)$. 如果令 $\varGamma=\dfrac{R}{L}$，$\varOmega^2=\dfrac{1}{LC}$ 和 $\xi(t)=\dfrac{1}{LC}\eta(t)$，则得到一个阻尼噪声振子方程

$$\ddot{\varepsilon}(t)+\varGamma\dot{\varepsilon}(t)+\varOmega^2\varepsilon(t)=\xi(t), \tag{4.80}$$

这里 $\xi(t)$ 是一个白噪声，满足 $\langle\xi(t)\rangle=0$，$\langle\xi(t)\xi(s)\rangle=2\alpha\delta(t-s)$，$\alpha$ 为噪声强度参量，将在下面确定.

阻尼噪声振子满足的随机微分方程也可写为

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}(t)&=u(t),\\ \dot{u}(t)&=-\varGamma u(t)-\varOmega^2\varepsilon(t)+\xi(t),\end{aligned} \tag{4.81}$$

如果将“速度” $u(t)$ 作为一个噪声项输出，那么它就被称为简谐速度噪声 (HVN)，其对应于 RLC 串联电路的电流 $i(t)$.

2. 简谐速度噪声的关联函数

解方程 (4.81)，可得阻尼噪声振子的速度表达式

$$u(t)=a_{10}\mu_1\mathrm{e}^{\mu_1 t}+a_{20}\mu_2\mathrm{e}^{\mu_2 t}+\frac{1}{\mu_1-\mu_2}\int_0^t\left[\mu_1\mathrm{e}^{\mu_1(t-t')}-\mu_2\mathrm{e}^{\mu_2(t-t')}\right]\xi(t')\mathrm{d}t', \tag{4.82}$$

关联函数为

$$\begin{aligned}\langle u(t)u(s)\rangle=&\left[\mu_1^2\langle a_{10}^2\rangle+\frac{\mu_1\alpha}{(\mu_1-\mu_2)^2}\right]\mathrm{e}^{\mu_1(t+s)}+\left[\mu_2^2\langle a_{20}^2\rangle+\frac{\mu_2\alpha}{(\mu_1-\mu_2)^2}\right]\mathrm{e}^{\mu_2(t+s)}\\&+\left[\mu_1\mu_2\langle a_{10}a_{20}\rangle-\frac{2\mu_1\mu_2\alpha}{(\mu_1+\mu_2)(\mu_1-\mu_2)^2}\right](\mathrm{e}^{\mu_1 t+\mu_2 s}+\mathrm{e}^{\mu_2 t+\mu_1 s})\\&+\frac{\alpha}{\mu_1^2-\mu_2^2}\left[-\mu_1\mathrm{e}^{\mu_1|t-s|}+\mu_2\mathrm{e}^{\mu_2|t-s|}\right],\end{aligned} \tag{4.83}$$

其中，μ_1 和 μ_2 是特征方程 $\mu^2+\varGamma\mu+\varOmega^2=0$ 的两个根. 若令方程 (4.83) 的前三项恒等于零，则简谐速度噪声 $u(t)$ 的稳定关联函数为

$$\langle u(t)u(s)\rangle=\frac{\alpha}{\mu_1^2-\mu_2^2}\left[-\mu_1\mathrm{e}^{\mu_1|t-s|}+\mu_2\mathrm{e}^{\mu_2|t-s|}\right]. \tag{4.84}$$

3. 极限情况和频谱关系

由特征方程知 $\mu_1 = [-\Gamma + \sqrt{\Gamma^2 - 4\Omega^2}]/2$ 和 $\mu_2 = [-\Gamma - \sqrt{\Gamma^2 - 4\Omega^2}]/2$，当 $\Omega \to 0$ 时，有 $\mu_1 \to 0$，$\mu_2 \to -\Gamma$，因此 $\langle u(t)u(s)\rangle = (\alpha/\Gamma)\mathrm{e}^{-\Gamma|t-s|}$. 欲使简谐速度噪声能退化到 Ornstein-Uhlenbeck 噪声，必须满足条件 $\alpha/\Gamma = D\Gamma$，即 $\alpha = \Gamma^2 D$，此时有 $\langle u(t)u(s)\rangle = D\Gamma\mathrm{e}^{-\Gamma|t-s|}$. 进而当 $\Gamma \to \infty$，有 $\langle u(t)u(s)\rangle = 2D\delta(t-s)$，简谐速度噪声也能退化成白噪声.

对式 (4.84) 进行傅里叶变换，可得到简谐速度噪声的谱密度：

$$S(\omega) = \frac{2D\Gamma^2\omega^2}{\Gamma^2\omega^2 + (\Omega^2 - \omega^2)^2}. \tag{4.85}$$

可以看出，简谐速度噪声是一种“带通”噪声，谱密度在 $\omega = 0$ 处为零，当 $\omega \to \infty$，谱密度亦为零，它的峰值出现在 $\omega = \Omega$ 处，而其带宽取决于阻尼参数 Γ.

4.6.2 渐近态依赖于初始速度准备

简谐速度噪声能够诱发自由粒子的弹道扩散，可见第 4.4 节. 现考虑一个单位质量的布朗粒子在这种噪声驱动下，在一维周期势 $U(x) = -U_0\cos(x)$ 中运动，方程如下：

$$\ddot{x}(t) + \int_0^t \gamma(t-s)\dot{x}(s)\,\mathrm{d}s + U'(x) = z(t), \tag{4.86}$$

式中，记忆阻尼核函数 $\gamma(t)$ 与简谐速度噪声 $z(t)$ 满足 Kubo 涨落耗散定理：$\langle z(t)z(s)\rangle = k_{\mathrm{B}}T\gamma(t-s)$，$T$ 为热库温度. 为了将非马尔可夫广义朗之万方程 (4.86) 转换成一个马尔可夫型朗之万方程组，现引入两个辅助变量

$$\omega(t) = -\int_0^t \gamma(t-s)\dot{x}(s)\,\mathrm{d}s + z(t), \tag{4.87}$$

$$u(t) = -\int_0^t [\dot{\gamma}(t-s) + \Gamma\gamma(t-s)]\dot{x}(s)\,\mathrm{d}s, \tag{4.88}$$

替换方程 (4.86) 中的积分项，则运动方程转化为一个 6 维马尔可夫型朗之万方程组

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = v(t), \\ \dot{v}(t) = \omega(t) - U'(x), \\ \dot{\omega}(t) = -\Gamma\omega(t) - \eta_0\Gamma v(t) - \Omega^2 y(t) - u(t) + \Gamma\xi(t), \\ \dot{u}(t) = \Omega^2[\omega(t) - z(t)], \\ \dot{y}(t) = z(t), \\ \dot{z}(t) = -\Gamma z(t) - \Omega^2 y(t) + \Gamma\xi(t). \end{cases} \tag{4.89}$$

之所以能够这样做，是因为色噪声 $z(t)$ 满足二阶微分方程 (4.81)(即这一方程中的 $u(t)$)，而且记忆阻尼核函数 (4.84) 式具有指数形式. 为了保证噪声变量 $z(t)$ 和 $y(t)$ 为稳定过程，即它们的关联函数具有时间平移不变性，则要求两者的初始分布满足两个独立的高斯函数，其二次矩为

$$\{z^2(0)\} = \eta_0 \varGamma k_{\rm B} T, \quad \{y^2(0)\} = \eta_0 \varGamma k_{\rm B} T/\varOmega^2. \tag{4.90}$$

那么由方程 (4.87) 和 (4.88) 可知，$\omega(t)$ 和 $u(t)$ 的初始条件为 $\omega(0) = z(0), u(0) = 0$.

我们用二阶随机 Runge-Kutta 方法对方程组 (4.89) 进行蒙特卡罗模拟. 取粒子的初始速度分布为高斯函数，满足 $\{v(0)\} = 0, \{v^2(0)\} = k_{\rm B}T_0/m$，其中 $\{\cdots\}$ 代表初始值平均，T_0 为系统初始温度.

图 4.4 给出了粒子的平均能量随时间的变化，这里粒子的初始坐标选为坐标原点，但初始温度不同. 在低到中等温度，如 $T = 1$ 时，粒子稳态的平均动能不依赖于初始温度；当温度升高，如 $T = 5$ 时，稳态平均动能依赖于初始速度；平均势能的稳态值在 $T = 1$ 和 $T = 5$ 两种情况下，都与初始速度分布无关. 这表明粒子的速度是一个非各态历经变量，而坐标是一个各态历经变量. 因为当温度远大于势垒高度时，粒子运动很活跃，周期场的束缚作用弱小，粒子相当于在自由场中运动. 由于粒子的有效摩擦 $\hat{\gamma}(0) = \displaystyle\int_0^\infty \gamma(t)\,{\rm d}t$ 等于零，导致粒子与环境之间的能量交换不充分，其初始动能没有被完全消耗掉，即它的速度二次矩对其初始准备有记忆，表现为非各态历经. 而低温时，粒子被束缚在势场极小处，这时周期场的作用相当于束缚场，外势场弥补了系统能量耗散及热库传递给系统热能量的不足，系统的各态历经性得到恢复.

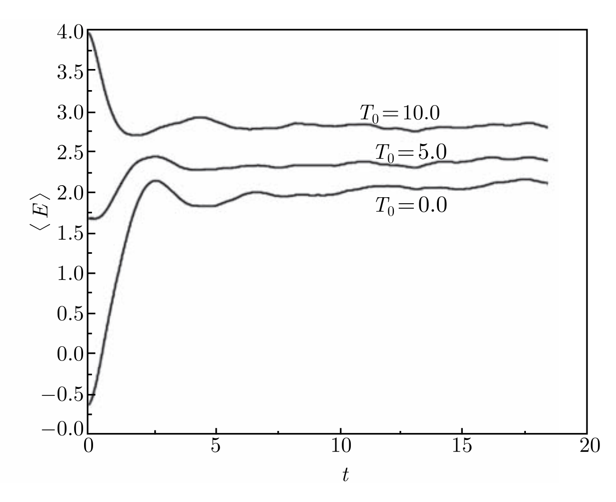


图 4.4　周期势中的粒子在不同的初始速度分布下的平均能量. 所取参数为：$T = 5.0$, $U_0 = 1$, $\varOmega = 1.0$, $\eta_0 = 1.0$

不过，粒子长时间后的平均动能和平均势能都不依赖于粒子的初始坐标准备. 以上的结果和分析告诉我们：记忆阻尼核函数的拉普拉斯变换低频为零的粒子在周期场中运动时，随温度的变化，发生各态历经向非各态历经性的转换. 高温时，粒子相当于在自由场中做弹道扩散，系统的稳态平均动能依赖于它的初始速度准备，呈现非各态历经性；低温时，粒子受到势的束缚作用，各态历经性得到恢复.

总之，粒子的速度是非各态历经变量而坐标是各态历经变量的运动，称为第一类非各态历经运动，其各态历经性可通过一个外部束缚势场得以恢复.

4.6.3 渐近态依赖于初始坐标准备

现用 HVN 驱动粒子，其长时速度变量作为一个噪声源 $\zeta(t)$，再去驱动一个自由粒子，仍用广义朗之万方程来描述 $m\ddot{x}+m\int_0^t\beta(t-s)\dot{x}(s)\mathrm{d}s=\zeta(t)$. 稳定的噪声 $\zeta(t)$ 满足 Kubo 涨落耗散定理

$$\langle\zeta(t)\zeta(s)\rangle=mk_{\mathrm{B}}T\beta(t-s), \tag{4.91}$$

上式中 $\beta(t)$ 为记忆阻尼核函数.

简谐速度噪声驱动一个自由粒子运动，得到速度变量，将它的稳定关联函数，即 (4.48) 式代入方程 (4.91)，得到记忆阻尼核函数

$$\beta(t)=b+\beta_1(t)=\frac{1}{1+\eta_0\varGamma/\varOmega^2}+\frac{\eta_0\varGamma}{\nu_1-\nu_2}\left(-\frac{\mathrm{e}^{\nu_1 t}}{\nu_1}+\frac{\mathrm{e}^{\nu_2 t}}{\nu_2}\right), \tag{4.92}$$

其拉普拉斯变换形式为

$$\hat{\beta}(z)=\frac{b}{z}+\frac{\eta_0\varGamma(z+\varGamma)}{(\eta_0\varGamma+\varOmega^2)(z^2+\varGamma z+\varOmega^2+\eta_0\varGamma)}, \tag{4.93}$$

具有如下低频性质：

$$\hat{\beta}(0)\to\infty,\quad \lim_{z\to 0}z\hat{\beta}(z)=\text{常量}. \tag{4.94}$$

记忆阻尼核函数的拉普拉斯变换在低频发散，这将会导致粒子的各态历经性被破坏. 若将简谐速度噪声驱动的周期势中运动的粒子的速度变量作为一个噪声，则其功率谱依赖于热库温度 T，当温度远大于周期势场的位垒高度时，系统的有效阻尼无穷大，将在自由粒子初始所处的位置上添加一个阻尼陷阱.

一般情况下，无法用变量扩展的方案来消除广义朗之万方程中的阻尼记忆积分项，那么就要用求和计算积分. 也就是说，我们通过蒙特卡罗方法来构造广义朗之万方程中的记忆阻尼核函数：记 $\beta(t)$ 和 $v(t)$ 为一维数组，分别记录 N 个轨道在不同时刻阻尼核的值和粒子的速度. 粒子 t 时刻 ($t=i\Delta t$，其中 Δt 为时间步长) 的记忆速度项

$$\int_0^t\beta(t-s)v(s)\,\mathrm{d}s=\sum_{k=0}^{i-1}\beta[(i-k)\Delta t]v(k\Delta t)\Delta t, \tag{4.95}$$

则粒子运动的方程组可表示为如下形式：

$$
\begin{aligned}
\dot{x} &= v, \\
\dot{v} &= -\sum_{k=0}^{i-1} \beta[(i-k)\Delta t] v(k\Delta t)\Delta t + \xi(t).
\end{aligned} \tag{4.96}
$$

用二阶随机 Runge-Kutta 算法迭代求解以上方程组，得到粒子的坐标二次矩 $\langle x^2(t)\rangle$ 和速度二次矩 $\langle v^2(t)\rangle$.

图 4.5 显示了自由粒子的坐标二次矩随时间的变化曲线. 从图中可见，长时间后粒子的方均位移不再随时间增长，相当于粒子的扩散被局域化. 我们发现粒子的坐标二次矩的渐进值依赖于本身的初始准备，而速度二次矩仍然满足能量均分定理，其渐进值不依赖它的初始值. 故此粒子的坐标是一个非各态历经变量，而速度是一个各态历经变量.

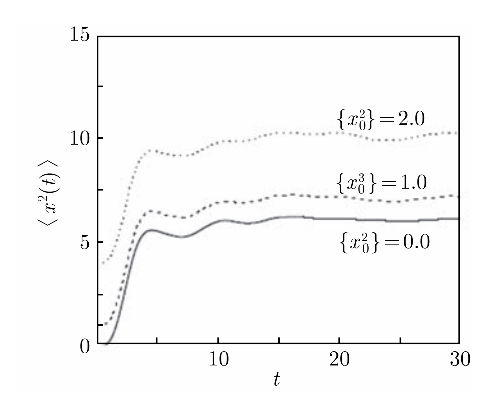


图 4.5　自由粒子在不同的初始坐标分布下的坐标二次矩. 所取参数为：$T = 1.0$, $U_0 = 1$, $\varGamma = 1.0$, $\varOmega = 1.0$, $\eta = 1.0$, $\{v_0^2\} = 0$

加入一个有界势后，粒子的长时间坐标二次矩依然依赖于它的初始坐标准备，即不能通过外加束缚势使各态历经性得到恢复. 这是因为局域化情况发生时，粒子的有效摩擦强度为无穷大，其被局域在初始所处位置的附近作振荡，导致原来的力自由粒子不能随时间的增长而无限地扩散. 即使加上一个外部束缚势，粒子坐标二次矩的渐进值仍依赖于初始分布，即粒子的各态历经性不能通过外加束缚势而得到恢复. 我们把这种初始坐标的影响无法消失，而初始速度不影响系统的长时结果的随机过程，称为*第二类非各态历经运动*.

4.7　系统加热库模型的推广

对开放系统的研究是经典和量子统计领域的一个极其重要的课题，而了解其

阻尼和随机力的微观来源亦是一个关键问题. 人们为了很好地描述耗散和涨落过程，建立了三种常用的系统加热库模型：独立振子模型、FKM 模型和 Rubin 模型. 独立振子模型最早是由 Ullersma 提出的，后来 Zwanzig 把它推广到在非谐势场运动的粒子. Caldeira 和 Leggett 第一次利用这个模型研究了量子隧穿机制. 当考虑环境振子间的耦合作用时，通常采用 FKM 和 Rubin 模型，即选取系统坐标与环境坐标的双线性耦合. 过去，人们认为速度耦合等价于坐标耦合，理由是包含速度耦合的哈密顿量可以通过正则变换成为与坐标耦合相似的形式. 然而，我们发现两种耦合并不等价，因为出现在描写系统运动的广义朗之万方程中的噪声谱密度完全不同. 此外，推导广义朗之万方程的技术还有投影算子方法、矩阵连分式方法等.

考虑一个由 N 个相互耦合的粒子组成的孤立系统 S，总能量为常量. 我们把这个系统分为两个部分 s_1 和 s_2，并关注于 s_1 的时间演化研究. 由于 s_1 和 s_2 之间的耦合，这两个部分将彼此交换能量. 例如，初始 s_1 和 s_2 分别失去和获得能量，如果 s_1 和 s_2 都具有有限自由度，那么能量将从 s_1 流向 s_2，接着又从 s_2 流向 s_1，因此能量流没有固定的方向. 与摩擦力现象不同，s_1 和 s_2 在时间逆变换 $t \to -t$，$r_i \to r_i$，$\dot{r}_i \to -\dot{r}_i$ 下，其运动具有不变性. 但是，如果 s_1 包含少量自由度，s_2 包含无限数目的自由度，而且初始时刻能量流的方向是从 s_1 到 s_2，那么 s_1 将持续失去能量，称 s_1 为耗散系统，系研究对象；s_2 称为热库，通常用一组简谐振子表示. 系统与热库每个独立自由度之间存在耦合，因此对于宏观环境，热库中的振动模感受到的耦合极其微弱，可以合理假设系统与热库之间的耦合形式是线性的，从而能够精确地消除热库相关变量.

本节将对三种系统加热库模型进行比较，包括独立振子模型、FKM 模型和 Rubin 模型. 从微观哈密顿量出发推导系统所满足的广义朗之万方程，并分析方程中的噪声谱密度和记忆阻尼核函数的性质. 还将介绍气固耦合模型，通过消除相互耦合的热库振子的坐标变量得到固体表面末端振子所满足的广义朗之万方程，从而把多体问题简化为两体问题.

4.7.1 独立振子模型

1. 系统加热库的总哈密顿量

独立振子模型是描述随机动力学最常用的一个微观模型，常称为 Caldeira-Leggett 模型，也叫做 Ullesrma 模型. 热库被看成由无限多个独立的简谐振子组成，采用可分离的系统坐标与热库坐标的双线性乘积形式，如图 4.6 所示. 系统加热库的总哈密顿量写作

$$H = H_S + H_B + H_I = \frac{p^2}{2M} + V(x) + \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2}m_j\omega_j^2 q_j^2\right] - x\sum_{j=1}^{N} c_j q_j, \quad (4.97)$$

式中，$\{q_j, p_j\}$ 为第 j 个热库谐振子的坐标和动量，m_j 是它的质量，ω_j 是其振动频率，c_j 是第 j 个振子与系统的耦合系数. H_S 为所感兴趣的系统的哈密顿量，H_B 是环境热库的哈密顿量，H_I 为系统与热库之间相互作用的哈密顿量. 其中系统的哈密顿量为

$$H_S = \frac{p^2}{2M} + V(x), \tag{4.98}$$

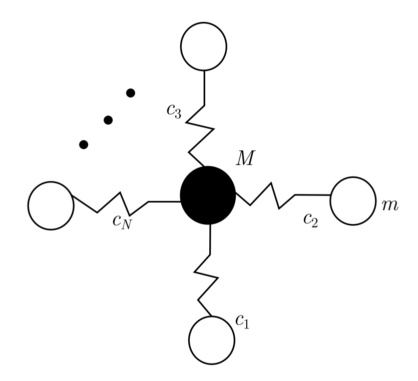


图 4.6　独立振子模型示意图

$V(x)$ 是作用在系统上的外部势场. 哈密顿量 (4.97) 式的写法存在两个缺陷.

(1) 对于自由粒子系统，即 $V(x)=0$，不存在能量低阈值. 这意味着系统没有热平衡态，热库不具有耗散性.

(2) 同样对于自由势场，哈密顿量在空间转变下不是不变的，即失去空间转变不变性. 因此，哈密顿量 (4.97) 式需要修正.

现引入添加项 $\sum_{j=1}^{N} \frac{c_j^2}{2m_j\omega_j^2}x^2$，线性耦合的哈密顿量 (4.97) 式变为如下形式：

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x) + \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2}m_j\omega_j^2\left(q_j - \frac{c_j}{m_j\omega_j^2}x\right)^2\right], \tag{4.99}$$

修正后的哈密顿量 (4.99) 式即为广泛使用的 Caldeira-Leggett(CL) 模型. 这种写法的好处是不会带来因耦合所引起的势重整化. 需要强调指出的是，这种哈密顿量的修正方式是非唯一的，不同的哈密顿量修正将会导致形式迥异的广义朗之万方程. 对于系统加热库模型，这种耦合项的转换不变性是至关重要的. 若考虑热库振子与系统之间的耦合方式是非线性的，则相互作用的哈密顿量写为

$$H_I = \sum_{j=1}^{N} c_j q_j(t)\varPhi(x), \tag{4.100}$$

其中，$\varPhi(x)$ 是系统坐标 x 的函数. 例如，在旋转隧道系统、极化子系统、Josephson 系统都存在这种非线性耦合.

2. 广义朗之万方程和谱密度分析

基于正则方程，我们可以写出系统和环境振子坐标满足的耦合运动方程，因为在哈密顿量中，环境所有振子的坐标和速度均为平方型且是独立的，所以可先将它们严格解出来. 由于人们通常关心的是系统变量，而应将环境振子变量消除，消除

的方式就是将它们的解代入系统坐标满足的方程之中，那么，环境对系统的影响最终体现在布朗粒子感受噪声和阻尼的作用．我们写出系统坐标遵守的广义朗之万方程：

$$M\ddot{x}(t) = -V'(x) - M\int_0^t \gamma(t-s)\dot{x}(s)\,\mathrm{d}s + \xi(t), \tag{4.101}$$

其中，$\gamma(t)$ 和 $\xi(t)$ 分别代表阻尼核函数和随机力，其表达式分别为

$$\gamma(t) = \frac{1}{M}\sum_{j=1}^{N}\frac{c_j^2}{m_j\omega_j^2}\cos(\omega_j t), \tag{4.102}$$

$$\xi(t) = \sum_{j=1}^{N} c_j\left[\tilde{q}_j(0)\cos(\omega_j t) + \frac{\dot{q}_j(0)}{\omega_j}\sin(\omega_j t)\right], \tag{4.103}$$

式中，$\tilde{q}_j(0)$ 为重新定义的热库振子坐标的初始位置．通常假设初始时刻热库振子坐标和动量处于如下形式的正则平衡分布

$$P_R = Z^{-1}\exp\left\{-\beta\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2(0)}{2m_j} + \frac{m_j\omega_j^2}{2}\left(q_j(0) - \frac{c_j}{m_j\omega_j^2}x(0)\right)^2\right]\right\}. \tag{4.104}$$

易证 $\gamma(t)$ 与 $\xi(t)$ 满足涨落耗散定理：

$$\langle\xi(t)\xi(s)\rangle = Mk_{\mathrm{B}}T\gamma(t-s). \tag{4.105}$$

这个定理将平衡态下的涨落与弛豫过程的耗散联系了起来，一般情况下，它保证了正则系统走向平衡态．

下面从频率的角度分析热库振子的谱密度．记忆阻尼核函数 $\gamma(t)$ 的傅里叶变换为

$$\begin{aligned}\tilde{\gamma}(\omega) &= \tilde{\gamma}(\omega') + \mathrm{i}\tilde{\gamma}(\omega'')\\ &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\gamma(t)\,\mathrm{d}t = \lim_{\epsilon\to 0^+} -\mathrm{i}\frac{\omega}{M}\sum_{j=1}^{N}\frac{c_j^2}{m_j\omega_j^2}\frac{1}{\omega_j^2 - \omega^2 - \mathrm{i}\omega\epsilon},\end{aligned} \tag{4.106}$$

引入环境热库振子的谱密度函数

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2}\sum_{j=1}^{N}\frac{c_j^2}{m_j\omega_j}\delta(\omega - \omega_j). \tag{4.107}$$

合适地选择独立振子的频率和耦合常数分布，上式可以确定记忆阻尼核函数的谱密度．需要注意的是当热库振子数 N 很大时，庞加莱回归时间看作无限，此时可以把离散求和 (4.107) 式转化为连续谱密度的频率积分，则频率阻尼函数表示为

$$\tilde{\gamma}(\omega) = -\mathrm{i}\frac{\omega}{M}\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{J(\omega')}{\omega'}\frac{\mathrm{d}\omega'}{\omega'^2 - \omega^2 - \mathrm{i}0^+}, \tag{4.108}$$

从而可知，频率阻尼函数与振子分布谱函数 $J(\omega)$ 的关系为

$$\tilde{\gamma}'(\omega) = \frac{1}{M}\frac{J(\omega)}{\omega}, \tag{4.109}$$

$\tilde{\gamma}(\omega)$ 的实部和虚部满足 Kramers-Kronig 关系. 为研究方便，有时需要考虑阻尼核函数的拉普拉斯变换 $\hat{\gamma}(z)$，其与 $\tilde{\gamma}(\omega)$ 满足如下关系

$$\hat{\gamma}(z) = \tilde{\gamma}(\omega = \mathrm{i}z), \quad \tilde{\gamma}(\omega) = \hat{\gamma}(z = -\mathrm{i}\omega + 0^+), \tag{4.110}$$

其表达式为

$$\hat{\gamma}(z) = \frac{z}{M}\sum_{j=1}^{N}\frac{c_j^2}{m_j\omega_j^2}\frac{1}{\omega^2+z^2} = \frac{z}{M}\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{J(\omega')}{\omega'}\frac{1}{\omega'+z^2}\,\mathrm{d}\omega'. \tag{4.111}$$

系统的动力学完全由质量 M、外加束缚势 $V(x)$ 和谱密度 $J(\omega)$ 决定. 而从方程 (4.109) 可知，$J(\omega)$ 只与频率阻尼函数 $\tilde{\gamma}(\omega)$ 有关. 利用方程 (4.108)，给出阻尼核函数 $\gamma(t)$ 与谱密度 $J(\omega)$ 之间的关系式

$$\gamma(t) = \Theta(t)\frac{1}{M}\frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{J(\omega)}{\omega}\cos(\omega t)\,\mathrm{d}\omega, \tag{4.112}$$

式中，$\Theta(t)$ 为阶梯函数，即当 $t>0$，$\Theta(t)=1$；当 $t<0$，$\Theta(t)=0$. 由傅里叶逆变换得到

$$J(\omega) = M\omega\int_0^\infty \gamma(\omega)\cos(\omega t)\,\mathrm{d}\omega. \tag{4.113}$$

谱密度 $J(\omega)$ 也可表示为记忆阻尼核函数 $\gamma(t)$ 的拉普拉斯变换，即

$$J(\omega) = \lim_{\epsilon\to 0^+} M\omega[\hat{\gamma}(\epsilon+\mathrm{i}\omega)+\hat{\gamma}(\epsilon-\mathrm{i}\omega)]/2. \tag{4.114}$$

3. 速度相关的耦合方式

系统与热库的耦合方式除了系统坐标和环境振子坐标之间的乘积外，还有其他三种乘积耦合方式：系统坐标与环境振子速度、系统速度与环境振子坐标、系统速度与环境振子速度的耦合. 仍然可以推导出系统变量所满足的广义朗之万方程以及涨落耗散定理，两者的形式均不变，但重要的差别在于记忆阻尼核函数或噪声的谱密度发生了变化. 例如，系统动量 (速度) 与环境振子坐标耦合方式下的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2M}\left[p+\sum_{j=1}^{N}c_jq_j\right]^2 + V(x) + \sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{2m_j}+\frac{1}{2}m_j\omega_j^2q_j^2\right]. \tag{4.115}$$

通过一个幺正变换 $U=\exp\left[-\dfrac{\mathrm{i}}{\hbar}x\sum_{j=1}^{N}m_j\omega_j q_j\right]$，上式被转化为与 (4.97) 式相似的哈密顿量形式，但是两者所给出的噪声谱密度不同．速度与坐标耦合的哈密顿量 (4.115) 式的振子谱密度函数为

$$J(\omega)_{v-x}=\omega\mathrm{Re}[\tilde{\gamma}(\omega+\mathrm{i}0^+)]=\frac{\pi}{2}\sum_{j=1}^{N}\frac{c_j^2\omega_j}{m_j}\delta(\omega-\omega_j). \tag{4.116}$$

可见 (4.116) 式与 (4.107) 式不同，它们存在关系：$J(\omega)_{v-x}=\omega^2 J(\omega)_{x-x}$.

1) 黑体辐射场

系统速度与环境坐标耦合的典型例子是黑体辐射场．考虑一个单电子原子在一个辐射场中运动，在偶极近似下哈密顿量写为

$$\begin{aligned}H_{\mathrm{QED}}&=\frac{1}{2M}\left[\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right]^2+V(\boldsymbol{r})+\sum_{\boldsymbol{k},s}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left(a_{\boldsymbol{k},s}^{+}a_{\boldsymbol{k},s}+\frac{1}{2}\right)\\&=\frac{1}{2M}\left[\boldsymbol{p}+\sum_{\boldsymbol{k},s}m_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{q}_{\boldsymbol{k},s}\hat{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{k},s}\right]^2+V(\boldsymbol{r})+\sum_{\boldsymbol{k},s}\left[\frac{1}{2m_{\boldsymbol{k}}}\boldsymbol{p}_{\boldsymbol{k},s}^2+\frac{1}{2}m_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}}^2\boldsymbol{q}_{\boldsymbol{k},s}^2\right].\end{aligned} \tag{4.117}$$

合理选择电子的形状因子

$$f_{\boldsymbol{k}}^2=\frac{\varOmega^2}{\omega^2+\varOmega^2}, \tag{4.118}$$

其中，$\varOmega$ 是一截断频率．在大辐射空腔极限下，一维系统的记忆阻尼核函数为

$$\gamma(t)=\frac{2e^2\varOmega^2}{3c^3M}[\delta(t)-\varOmega\mathrm{e}^{-\varOmega t}], \tag{4.119}$$

上式的拉普拉斯变换为

$$\hat{\gamma}(z)=\frac{\gamma_0 z}{z+\varOmega}. \tag{4.120}$$

显然，$\hat{\gamma}(0)=0$，不过 $\lim\limits_{z\to 0}[\hat{\gamma}(z)/z]$ 是一个有限值. 这种与速度相关的耦合将引起第一类非各态历经运动.

2) 旋转波近似

系统速度与环境速度耦合的实际例子是旋转波近似 (RWA)，其经常用于量子光学相关问题的研究．考虑简谐外势场 $V(x)=m\omega_0^2x^2/2$，总的哈密顿量写作

$$H_{\mathrm{RWA}}=\hbar\omega_0\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)+\sum_j\hbar\omega_j\left(b^+b+\frac{1}{2}\right)+\sum_j\frac{\hbar\lambda_j}{2(Mm_j\omega_0\omega_j)^{1/2}}(ab^++a^+b), \tag{4.121}$$

其中，a、b 为两振子算符，它们的定义式分别为

$$a=\frac{M\omega_0 x+\mathrm{i}p}{(2M\hbar\omega_0)^{1/2}},\quad b=\frac{m_j\omega_j q_j+\mathrm{i}p_j}{(2m_j\hbar\omega_j)^{1/2}},\tag{4.122}$$

把振子算符 a 和 b 的定义式代入方程 (4.121)，得到

$$H_{\mathrm{RWA}}=\frac{p^2}{2M}+\frac{1}{2}M\omega_0^2x^2+\sum_j\left[\frac{p_j^2}{2m_j}+\frac{1}{2}m_j\omega_j^2q_j^2\right]+\frac{1}{2}x\sum_j\lambda_jq_j+\frac{p}{2M\omega_0}\sum_j\frac{\lambda_j}{m_j\omega_j}p_j.\tag{4.123}$$

注意到 (4.123) 式的哈密顿量，对于足够小的 ω_0，系统最低的正则模频率是虚数，能量本征值的连续谱延伸到 $-\infty$，此形式下系统与热库的耦合不具有耗散性. 通过引入添加项，修正后的哈密顿量写作

$$\begin{aligned}H_{\mathrm{RWA}}=&\frac{1}{2M}\left[p+\sum_j\frac{\lambda_j}{2m_j\omega_j\omega_0}p_j\right]^2+\frac{1}{2}M\omega_0^2x^2\\&+\sum_j\left[\frac{p_j^2}{2m_j}+\frac{1}{2}m_j\omega_j^2\left(q_j+\frac{\lambda_j}{2m_j\omega_j^2}x\right)^2\right].\end{aligned}\tag{4.124}$$

对上式中的变量作如下代换

$$\begin{aligned}&p\to\exp\left(\mathrm{i}x\sum_j\frac{\lambda_jp_j}{2\hbar\omega_0m_j\omega_j}\right)p\exp\left(-\mathrm{i}x\sum_j\frac{\lambda_jp_j}{2\hbar\omega_0m_j\omega_j}\right)=p-\sum_j\frac{\lambda_jp_j}{2m_j\omega_j\omega_0},\\&x\to x,\quad p_j\to p_j,\quad q_j\to q_j+\frac{\lambda_jx}{2m_j\omega_j\omega_0},\end{aligned}\tag{4.125}$$

使哈密顿量 (4.124) 式变为

$$H_{\mathrm{RWA}}=\frac{p^2}{2M}+\frac{1}{2}M\omega_0^2x^2+\sum_j\left\{\frac{p_j^2}{2m_j}+\frac{1}{2}m_j\omega_j^2\left[q_j+\frac{\lambda_j(\omega_j+\omega_0)}{2m_j\omega_j^2\omega_0}x\right]^2\right\}.\tag{4.126}$$

(4.126) 式与 (4.97) 式形式相似，但是两者所给出的振子谱密度却不同，存在关系式：$J(\omega)_{v-v}=\omega^4J(\omega)_{x-x}$.

4. 四种耦合方式

以往考虑的系统与环境的耦合方式为系统坐标与环境振子坐标的双线性乘积，过去的研究指出，通过耦合系数的变换，则速度相关的耦合所给出的运动方程与坐标耦合的一样，所以就不再考虑其他方式的耦合. 现在希望将共有四种的耦合方式

一起考虑，又由于我们关心的是经典情况，那么总拉格朗日量为

$$\begin{aligned} L = & \frac{1}{2} m_{\text{eff}} \dot{x}^2 - V_{\text{eff}}(x) + \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{1}{2} m_j \dot{q}_j^2 - \frac{1}{2} m_j \omega_j^2 q_j^2 \right) \\ & + \sum_{j=1}^{N} (C_{00}^{j} x q_j + C_{01}^{j} x \dot{q}_j + C_{10}^{j} \dot{x} q_j + C_{11}^{j} \dot{x} \dot{q}_j). \end{aligned} \tag{4.127}$$

下面用 c-c 代表系统坐标与环境振子坐标存在乘积耦合，c-v 或 v-c 代表系统坐标 (速度) 与环境振子速度 (坐标) 之间的耦合，以 v-v 表示系统速度与环境振子的速度存在相互作用. 特别需要指出的是，在方程 (4.127) 中，我们事先用到了有效质量 m_{eff} 和有效势 V_{eff}，两者分别定义为

$$m_{\text{eff}} = m - \sum_{j=1}^{N} \frac{(C_{11}^{j})^2}{m_j}, \quad V_{\text{eff}}(x) = V(x) + \sum_{j=1}^{N} \frac{(C_{00}^{j})^2}{2 m_j \omega_j} x^2. \tag{4.128}$$

这样做的好处是，在将来关于系统变量遵守的广义朗之万方程中，不存在 c-c 耦合带来的势重整化以及 v-v 耦合产生的质量重整化问题.

经过推导，我们给出同时存在四种耦合情况下，系统坐标所遵守的广义朗之万方程：

$$m\ddot{x} + m \int_0^t \gamma(t-s) \dot{x}(s) \mathrm{d}s + V'(x) = \xi(t), \tag{4.129}$$

其中,

$$\gamma(t-s) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{(C_{00}^{j} + \omega_j^2 C_{11}^{j})^2}{m_j \omega_j^2} + \frac{(C_{01}^{j} - {}_{10}^{j})^2}{m_j} \right] \cos \omega_j (t-s), \tag{4.130}$$

且

$$\begin{aligned} \xi(t) = & \sum_{j=1}^{N} \Big\{ [(C_{00}^{j} + \omega_j^2 C_{11}^{j}) \tilde{q}_j(0) + (C_{01}^{j} - C_{10}^{j}) \dot{\tilde{q}}(0)] \cos \omega_j t \\ & + \left[-(C_{01}^{j} - C_{10}^{j}) \omega_j \tilde{q}_j(0) + \left(\frac{C_{00}^{j} + \omega_j^2 C_{11}^{j}}{\omega_j} \right) \dot{\tilde{q}}_j(0) \right] \sin \omega_j t \Big\}, \end{aligned} \tag{4.131}$$

式中，$\tilde{q}_j(0) = q_j(0) - C_{00}^{j}/(m_j \omega_j^2) x(0)$，$\dot{\tilde{q}}_j(0) = \dot{q}_j(0) + C_{11}^{j}/m_j \dot{x}(0)$. 假设环境振子初始处于温度为 T 的热平衡状态，那么由于各个振子的坐标和速度是独立的且是平方型的，所以服从高斯分布. 按照能量均分定理，有 $\langle \tilde{q}_j(0) \rangle = 0$，$\langle \dot{\tilde{q}}_j(0) \rangle = 0$，$\langle \tilde{q}_i(0) \dot{\tilde{q}}_j(0) \rangle = 0$；描写涨落大小的是振子的二次矩：

$$\langle \tilde{q}_i(0) \tilde{q}_j(0) \rangle = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{m_j \omega_j^2} \delta_{ij}, \quad \langle \dot{\tilde{q}}_i(0) \dot{\tilde{q}}_j(0) \rangle = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{m_j} \delta_{ij}.$$

事实上，这个假设是合理的. 人们对环境变量总是要引入“淬火”近似，即环境振子是快变量，其达到平衡的时间远短于布朗粒子的特征时间尺度，环境振子分布即刻达到稳态. 那么，对布朗粒子的轨道求平均也就是对噪声的各种可能取值求平均. 同样，噪声关联函数与阻尼核函数之间满足涨落耗散定理：$\langle\xi(t)\xi(s)\rangle = mk_{\mathrm{B}}T\gamma(|t-s|)$

如果所有的耦合系数被假设成与环境振子的频率无关，那么速度相关的耦合与坐标–坐标耦合并不等价，因为它们的噪声谱密度不同. 阻尼核函数的傅里叶变换的实部 $\tilde{\gamma}(\omega)$ 与环境振子谱密度 $J(\omega)$ 存在着关系. 在独立振子模型中，粒子与第 j 个质量为 m_j、振动频率为 ω_j 的环境谐振子的耦合常数是 c_j，这三个量同时出现在阻尼核函数中. 若四种耦合振子频率分布函数分别为

$$\begin{aligned}
J_{c\text{-}c}(\omega) &= \frac{\pi}{2}\sum_{j}^{N}\frac{C_{00}^{j2}}{m_j\omega_j}\delta(\omega-\omega_j), \quad J_{c\text{-}v}(\omega) = \frac{\pi}{2}\sum_{j}^{N}\frac{C_{01}^{j2}\omega_j}{m_j}\delta(\omega-\omega_j),\\
J_{v\text{-}v}(\omega) &= \frac{\pi}{2}\sum_{j}^{N}\frac{C_{11}^{j2}\omega_j^3}{m_j}\delta(\omega-\omega_j),
\end{aligned} \tag{4.132}$$

则当 $C_{00}^j = C_{01}^j = C_{10}^j = C_{11}^j$，四种耦合的振子谱密度之间存在如下的关系：

$$J_{c\text{-}v} = J_{v\text{-}c} = \omega^2 J_{c\text{-}c}(\omega), \quad J_{v\text{-}v}(\omega) = \omega^4 J_{c\text{-}c}(\omega). \tag{4.133}$$

4.7.2 FKM 模型

FKM 模型是 Ford、Kac 和 Mazur 等在 1965 年提出的，他们首次建立了量子朗之万方程. 考虑 $2N$ 个全同的耦合谐振子组成的环形振子链，如图 4.7 所示. 把第零个振子作为研究对象 (质量为 M，不同于振子质量 m)，并置于外势场 $V(x)$ 中，则总的哈密顿量可写作

$$\begin{aligned}
H = {}& \frac{p^2}{2M} + V(x) + \frac{1}{2m}\sum_{j=1}^{2N}p_j^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\sum_{j=1}^{2N-1}(q_j-q_{j+1})^2\\
&+\frac{1}{2}m\omega^2[(x-q_1)^2+(x-q_{2N})^2],
\end{aligned} \tag{4.134}$$

谐振子之间只存在最近邻相互作用，(p,x) 是第零个振子的动量和坐标变量，(p_j,q_j) 是第 j 个振子的动量和坐标变量，ω 是振子间的耦合频率. 通过正则变换

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{m}}\sum_{k=1}^{2N}A_{kj}Q_k, \quad p_j = \sqrt{m}\sum_{k=1}^{2N}A_{kj}P_k, \tag{4.135}$$

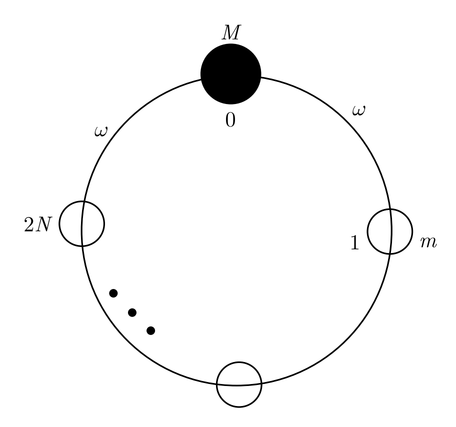


图 4.7　FKM 模型示意图

其中，矩阵元 A_{kj} 为

$$A_{kj} = \sqrt{\frac{2}{2N+1}} \sin\left(\frac{kj\pi}{2N+1}\right), \quad k,j = 1,2,\cdots,2N+1 \tag{4.136}$$

哈密顿量 (4.134) 式变为如下形式

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2N}(P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) + \sum_{k=1}^{2N} \varGamma_k Q_k x + m\omega^2 x^2, \tag{4.137}$$

其中，本征频率和耦合系数分别为

$$\omega_k = \omega \sin\left[\frac{k\pi}{2(2N+1)}\right], \tag{4.138}$$

$$\varGamma_k = \begin{cases} -\omega^2 x \sqrt{\dfrac{mk\pi}{2N+1}} \displaystyle\sum_{k=1}^{2N} \sin\left(\frac{k\pi}{2N+1}\right) Q_k, & k = 1,3,\cdots,2N-1; \\ 0, & k = 2,4,\cdots,2N. \end{cases} \tag{4.139}$$

已有的研究表明，在热力学极限下，对于各向同性的线性链，其局部相函数是各态历经变量. 此外，与各向同性链上的振子质量 m 不同的粒子 (质量为 M)，对于 $M < m$，其动能是非各态历经的；对于 $M > m$，其动能变为各态历经的.

4.7.3　Rubin 模型

质量为 M 的粒子，其坐标 q 与一个半无界简谐振子链的一端振子坐标双线性耦合，如图 4.8 所示. 考虑链中振子是全同的，质量为 m，弹簧倔强系数为 $f = m\omega_{\rm R}^2/4$，$\omega_{\rm R}$ 是振子最高频率模，则整个模型的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \sum_{n=0}^{\infty}\left[\frac{p_n^2}{2m} + \frac{f}{2}(x_{n+1} - x_n)^2\right] + \frac{f}{2}(q - x_1)^2, \tag{4.140}$$

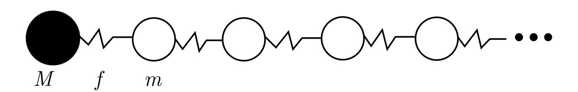


图 4.8　Rubin 模型示意图

利用傅里叶变换方法

$$x_n = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\pi} \sin(kn) X(k)\,\mathrm{d}k, \quad p_n = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\pi} \sin(kn) P(k)\,\mathrm{d}k, \tag{4.141}$$

使哈密顿量 (4.140) 式转变为正则模表示的哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \frac{f}{2}q^2 + \int_0^{\pi} \left[\frac{P^2(k)}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2(k) X^2(k) - c(k) X(k) q \right] \mathrm{d}k, \tag{4.142}$$

其中，本征频率 $\omega(k)$ 和耦合函数 $c(k)$ 分别为

$$\omega(k) = \omega_{\mathrm{R}} \sin\left(\frac{k}{2}\right), \quad c(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m\omega_{\mathrm{R}}^2}{4}\right) \sin(k). \tag{4.143}$$

振子谱密度为

$$\begin{aligned} J(\omega) &= \frac{\pi}{2} \int_0^{\pi} \frac{c^2(k)}{m\omega(k)} \delta[\omega - \omega(k)]\,\mathrm{d}k \\ &= \frac{m\omega_{\mathrm{R}}^3}{16} \int_0^{\pi} \frac{\sin^2(k)}{\sin\left(\frac{1}{2}k\right)} \delta[\omega - \omega(k)]\,\mathrm{d}k \\ &= \frac{m\omega_{\mathrm{R}}}{2}\omega \left(1 - \frac{\omega^2}{\omega_{\mathrm{R}}^2}\right)^{1/2} \Theta(\omega_R - \omega), \end{aligned} \tag{4.144}$$

当 $\omega \ll \omega_{\mathrm{R}}$ 时，上式退化为欧姆 (Ohmic) 谱.

记忆阻尼核函数的形式为

$$\gamma(t) = \Theta(t) \frac{1}{M} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos(\omega t) = \frac{m}{2M} \omega_{\mathrm{R}} \frac{\mathrm{J}_1(\omega_{\mathrm{R}} t)}{t}, \tag{4.145}$$

其中, $\mathrm{J}_1(z)$ 是一阶贝塞尔函数. 当 $t \gg 1/\omega_{\mathrm{R}}$，记忆阻尼核函数随时间变化呈现幂律衰减

$$\gamma(t) = \frac{m}{2M} \sqrt{\frac{2\omega_{\mathrm{R}}}{\pi}} \frac{\sin(\omega_{\mathrm{R}} t - \pi/4)}{t^{3/2}}. \tag{4.146}$$

这与 Drude 谱的指数衰减不同.

习　　题

4-1　试通过引入附加变量，将内部简谐噪声驱动的广义朗之万方程变换成为一个马尔可夫朗之万方程组.

4-2　试通过引入附加变量，将内部简谐速度噪声驱动的广义朗之万方程变换成为一个马尔可夫朗之万方程组.

4-3　已知一个色噪声 $\varepsilon(t)$ 的关联函数为两个强度相等，噪声关联时间分别为 τ_1 和 τ_2 的 OU 色噪声之差，即

$$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle = \frac{\eta_0 k_\mathrm{B} T\tau_1^2}{\tau_1^2-\tau_2^2}\left[\frac{1}{\tau_2}\exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau_2}\right)-\frac{1}{\tau_1}\exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau_1}\right)\right].$$

求证该噪声的谱密度为

$$S_\varepsilon(\omega) = k_\mathrm{B}T\frac{2\eta_0\tau_1^2\omega^2}{(1+\tau_1^2\omega^2)(1+\tau_2^2\omega^2)}.$$

4-4　若将上题的色噪声作为一个内部热噪声去驱动一个力自由广义朗之万方程，即

$$m\ddot{x}(t)+m\int_0^t \eta(t-t')\dot{x}(t')\mathrm{d}t' = \varepsilon(t),$$

涨落耗散定理被满足，$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle = k_\mathrm{B}T\eta(|t-t'|)$. 试证明粒子长时间呈现弹道扩散，即

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t^2}\langle x^2(t)\rangle = \frac{k_\mathrm{B}T}{m}\frac{a}{(1+a)^2},$$

其中，$a=\eta_0\tau_1^2/(\tau_1+\tau_2)$.

4-5　一个磁场中的电荷粒子满足如下的经典运动方程

$$m\ddot{\boldsymbol{R}}(t) = -\nabla U(\boldsymbol{R})+\frac{q}{c}\dot{\boldsymbol{R}}\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{\xi}(t),$$

其中，$\xi(t)$ 为一个高斯白噪声，标度势的形式为 $U=\dfrac{1}{2}m(\omega_x^2x^2+\omega_y^2y^2)-Fz$，外部磁场取作 $\boldsymbol{B}=(B,0,0)$. 试导出电荷粒子在 z 方向上的运动方程是

$$m\ddot{z}(t)+\frac{B^2}{m}\int_0^t\cos\omega_y(t-t')\dot{z}(t')\mathrm{d}t' = \varepsilon(t)+F,$$

其中，$\varepsilon(t)=B[y(0)\omega_y\sin\omega_y t-\dot{y}(0)\cos\omega_y t]$.

4-6　在上题中，假设 $\{y(0)\}=\{\dot{y}(0)\}=0$，$\{y(0)\dot{y}(0)\}=0$ 和 $\{\dot{y}^2(0)\}=\omega_y^2\{y^2(0)\}=k_{\mathrm{B}}T/m$，则涨落耗散定理被满足. 求证带电粒子的时间平均加速度为

$$\bar{a}_{\mathrm{c}}=\lim_{\varLambda\to\infty}\frac{1}{\varLambda}\int_t^{t+\varLambda}\mathrm{d}t'a(t')=\frac{F}{m}\frac{(m\omega_y)^2}{B^2+(m\omega_y)^2}.$$

4-7　对于一个速度与坐标耦合的哈密顿量:

$$H=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}\mu[\dot{q}^2+\omega^2q^2]+cx\dot{q},$$

加速度折合因子为

$$b=\frac{1}{1+c^2/(\omega^2m\mu)}.$$

4-8　对于一个声子模型而言，谱密度分布为: 当 $\omega_1<\omega<\omega_s$，$\rho_n(\omega)=C$; 其他频率为零. 求证因子 b 等于

$$b=\frac{1}{1+C(\omega_1^{-1}-\omega_s^{-1})}.$$

4-9　试证明，通过引入两个辅助变量 y_1 和 y_2，例 4.1 的广义朗之万方程能变成如下的马尔可夫朗之万方程组:

$$\begin{aligned}\dot{x}&=\dot{v},\quad m\dot{v}=y_1(t)+y_2(t),\\ \dot{y}_1&=-\frac{1}{\tau_1}y_1+\frac{A}{\tau_1}v(t)-\frac{1}{\tau_1}\xi(t),\\ \dot{y}_2&=-\frac{1}{\tau_2}y_2-\frac{A}{\tau_2}v(t)+\frac{1}{\tau_2}\xi(t).\end{aligned}$$

第 5 章　含非欧姆摩擦的广义朗之万方程

本章导读：从广义朗之万方程出发研究粒子的位置和速度关联函数，称之为二次动力学，其中内噪声谱密度与频率的幂成正比，而由涨落耗散定理联系的阻尼核函数的谱也如此，这就是著名的非欧姆摩擦模型. 发现在线性势中粒子的渐进方均位移正比于时间的幂，其中幂指数是一个介于 0 和 2 之间的任意分数；而变量的关联函数在长时间后既依赖于观测时间，也与等待时间有关，这就是老化问题. 应用到一些具体的势，获得意想不到的结果.

寻找基本的和需最少知识的物理模型是理论工作者的潜在动力. 对随机过程的描写而言，最为简单的无疑是朗之万方程了. 这里我们不涉及噪声和摩擦的微观起源，而噪声谱密度的知识就足以将模型确定下来. 例如，色噪声可由它的谱密度方便地确定，因为谱密度的逆傅里叶变换就是噪声的关联函数，它是噪声三要素中的最重要的一个，确定了噪声的“颜色”性，另两个要素是噪声强度和分布. 在一般意义下，色噪声的谱密度在低频区正比于 $\omega^{\delta-1}$，这里 $0<\delta<2$，而时间有关的记忆摩擦可以根据广义涨落耗散定理由噪声关联函数得到.

5.1　二次动力学和老化问题

涨落耗散框架能被用在经典区以及量子区，依赖于涨落耗散定理形式的选择. 在经典区域，模型允许描写反常扩散，也就是：欠扩散 $(0<\delta<1)$ 和超扩散 $(1<\delta<2)$. 当人们考虑一个动力学过程，粒子某个变量的二次时间关联函数，将面临一个有趣的物理效应：老化，即缺乏时间平移不变性. 例如，自由正常扩散布朗粒子的坐标的时间关联函数 $\langle x(t)x(t')\rangle$，不仅与两时刻差有关，即使在大年龄极限下，也明显地依赖于 t 和 t'. 而对于速度变量，其在长时间后平衡 (平均值为零，方均值满足能量均分定理)，无老化现象，但位移却是一个远离平衡的变量. 为了将响应函数与关联函数相联系，平衡态涨落耗散定理需要修正. 通过引入一个因子 (涨落与耗散比) 来标度温度，就能达到这一目的. 已有的结果表明：对于一个经典扩散粒子，涨落与耗散之比能够用时间有关的扩散系数 $D(\tau)$ 和 $D(t_w)$ 表示. 这里，$\tau=t-t'$ 代表观测时间，$t_w=t'$ 是等待时间. 这一结论能被推广到 0 与 2 之间的非整数 δ 情况.

5.1.1　拉普拉斯变换方法

设一个质量为 m 的经典粒子，在无势情况下遵守广义朗之万方程

$$m\dot{v}+m\int_0^t \gamma(t-t')v(t')\mathrm{d}t' = \xi(t), \tag{5.1}$$

式中，$\xi(t)$ 是一个作用在粒子上的朗之万力，通常为一个无偏的 (均值为零) 稳定高斯随机过程，$\gamma(t)$ 为折合阻尼核函数 ($\eta = m\gamma$ 为阻尼常量)，其是时间 t 的偶函数. 两者不是互相独立的，而是由久保第二涨落耗散定理相联系：

$$\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = k_{\mathrm{B}}Tm\gamma(|t-t'|), \tag{5.2}$$

其中，T 是温度，$\langle\cdots\rangle$ 代表在同一时刻对噪声实现的平均. 故这样的噪声称为热噪声或内部噪声.

为了获取线性微分方程的解及感兴趣动力学变量的一次和二次时间特性，最为方便的做法是对方程各项实施拉普拉斯变换，进而变成一个代数方程，所有量被考虑成因果函数. 例如，变量 $q(t)$ 的拉普拉斯变换为

$$\hat{q}(z) = \int_0^\infty q(t)\exp(-zt)\mathrm{d}t. \tag{5.3}$$

现将之运用于方程 (5.1)，有

$$mz\hat{v}(z) - mv_0 + m\hat{\gamma}(z)\hat{v}(z) = \hat{\xi}(z). \tag{5.4}$$

因为 $\xi(t)$ 是一个高斯过程，所以 $\hat{\xi}(z)$ 的统计行为也完全由平均值 $\langle\hat{\xi}(z)\rangle$ 和关联函数 $\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle$ 所确定.

$$\langle\hat{\xi}(z)\rangle = 0, \tag{5.5}$$

对于关联函数 $\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle$，根据涨落耗散关系得到

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle = k_{\mathrm{B}}Tm\int_0^\infty\int_0^\infty \mathrm{e}^{-zt}\mathrm{e}^{-z't'}\gamma(|t-t'|)\mathrm{d}t\mathrm{d}t'. \tag{5.6}$$

为计算 (5.6) 式的双重积分，我们分别处理来自时间区域 $t' \leqslant t$ 的 $\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle_1$ 和来自时间区域 $t' \geqslant t$ 的 $\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle_2$ 的两部分贡献. 首先考虑 $t' \leqslant t$ 区域的贡献，令 $u = t - t'$，得到

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle_1 = k_{\mathrm{B}}Tm\int_0^\infty \mathrm{e}^{-(z+z')t'}\mathrm{d}t'\int_0^\infty \mathrm{e}^{-zu}\gamma(u)\mathrm{d}u, \tag{5.7}$$

积分结果是

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle_1 = mk_{\mathrm{B}}T\frac{\hat{\gamma}(z)}{z+z'}; \tag{5.8}$$

接下来考虑 $t' \geqslant t$ 区域的贡献，

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle_2 = k_{\mathrm{B}}Tm\int_0^\infty \mathrm{e}^{-(z+z')t}\mathrm{d}t\int_0^\infty \mathrm{e}^{-z'v}\gamma(v)\mathrm{d}v, \tag{5.9}$$

积分结果是

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle_2 = mk_{\mathrm{B}}T\frac{\hat{\gamma}(z')}{z+z'}. \tag{5.10}$$

(5.8) 式和 (5.10) 式相加，有

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle = mk_{\mathrm{B}}T\frac{\hat{\gamma}(z)+\hat{\gamma}(z')}{z+z'}, \tag{5.11}$$

上式为涨落耗散定理在拉普拉斯空间的表示.

其实，(5.11) 式的关系具有更一般的意义，对于任何稳定关联函数，如果

$$\langle\phi(t)\phi(t')\rangle = Af(|t-t'|), \tag{5.12}$$

与 (5.11) 式相似，它的双拉普拉斯变换的结果为

$$\langle\hat{\phi}(z)\hat{\phi}(z')\rangle = A\frac{\hat{f}(z)+\hat{f}(z')}{z+z'}. \tag{5.13}$$

1. $\hat{v}(z)$ 的稳定行为

由方程 (5.4) 得到

$$\hat{v}(z) = \frac{v_0}{z+\hat{\gamma}(z)} + \frac{1}{m}\cdot\frac{\hat{\xi}(z)}{z+\hat{\gamma}(z)}. \tag{5.14}$$

因为 $\langle\hat{\xi}(z)\rangle = 0$，所以粒子速度拉普拉斯变换的平均等于

$$\langle\hat{v}(z)\rangle = \frac{v_0}{z+\hat{\gamma}(z)}, \tag{5.15}$$

两时刻速度关联函数 $\langle v(t)v(t')\rangle$ 的双拉普拉斯变换 $\langle\hat{v}(z)\hat{v}(z')\rangle$ 为

$$\langle\hat{v}(z)\hat{v}(z')\rangle = \frac{\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle}{m^2[z+\hat{\gamma}(z)][z'+\hat{\gamma}(z')]} + \frac{v_0^2}{[z+\hat{\gamma}(z)][z'+\hat{\gamma}(z')]}, \tag{5.16}$$

利用 (5.13) 式，上式重写作

$$\langle\hat{v}(z)\hat{v}(z')\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{\hat{K}(z)+\hat{K}(z')}{z+z'} + \left(v_0^2 - \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)\hat{K}(z)\hat{K}(z'), \tag{5.17}$$

这里 $\hat{K}(z)$ 定义为

$$\hat{K}(z) = \frac{1}{z+\hat{\gamma}(z)}. \tag{5.18}$$

(5.17) 式清楚地表明：对 $\langle\hat{v}(z)\hat{v}(z')\rangle$ 作逆拉普拉斯变换将给出关联函数，其直到稳定之前包含两部分．第一项对应着稳定随机过程的时间域；第二项是一个分别依赖 t 和 t' 的函数，而不仅仅与两时刻差 $t-t'$ 有关．如果后一项不为零，将对关联函数 $\langle v(t)v(t')\rangle$ 起到一个老化贡献．若对初始速度进行平衡系综平均，则老化项消除，在 (5.17) 式中就仅存在稳定项.

2. $\hat{x}(z)$ 的稳定行为

从 $\dot{x}=v$ 得到 $\hat{x}(z)$ 的表达式：

$$\hat{x}(z)=\frac{1}{z}\hat{v}(z), \tag{5.19}$$

对其求平均，有

$$\langle\hat{x}(z)\rangle=\frac{1}{z}\frac{v_0}{z+\hat{\gamma}(z)}. \tag{5.20}$$

假设粒子速度初始处于平衡态，即无老化. 两时间位移关联函数 $\langle x(t)x(t')\rangle$ 的双拉普拉斯变换 $\langle\hat{x}(z)\hat{x}(z')\rangle$ 为

$$\langle\hat{x}(z)\hat{x}(z')\rangle=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{1}{z}\frac{1}{z'}\frac{\hat{K}(z)+\hat{K}(z')}{z+z'}. \tag{5.21}$$

由于在 (5.21) 式右端存在因子 $1/z$ 和 $1/z'$，则关联函数 $\langle\hat{x}(z)\hat{x}(z')\rangle$ 不具有 (5.13) 式的形式，这导致在时间域内，坐标关联函数 $\langle x(t)x(t')\rangle$ 将依赖于 t 和 t'，故粒子位移是一个老化变量.

5.1.2 非欧姆朗之万模型中的噪声和摩擦

考虑色噪声具有如下的谱密度：

$$\langle|\xi(\omega)|^2\rangle=2k_{\mathrm{B}}T\eta_{\delta}\left(\frac{|\omega|}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\mathrm{c}}\left(\frac{|\omega|}{\omega_{\mathrm{c}}}\right), \tag{5.22}$$

$\langle|\xi(\omega)|^2\rangle$ 的小 $|\omega|$ 行为具有指数为 $\delta-1$ 的幂律，f_{c} 是一个宽度为 ω_{c} 的高频截断函数，并且 $\tilde{\omega}\ll\omega_{\mathrm{c}}$，其中 $\tilde{\omega}$ 代表使得耦合常数 $\eta_{\delta}=m\gamma_{\delta}$ 对任何 δ 具有黏滞量纲的参考频率. 当 $\delta=1$，噪声谱密度为一常数，即噪声至少在频率区域 $|\omega|\ll\omega_{\mathrm{c}}$ 为一白噪声. 白噪声情况对应于欧姆摩擦；而 $0<\delta<1$ 和 $1<\delta<2$ 分别对应于欠欧姆和超欧姆摩擦. 如图 5.1 所示. 这里假设 $0<\delta<2$，原因其后将谈到.

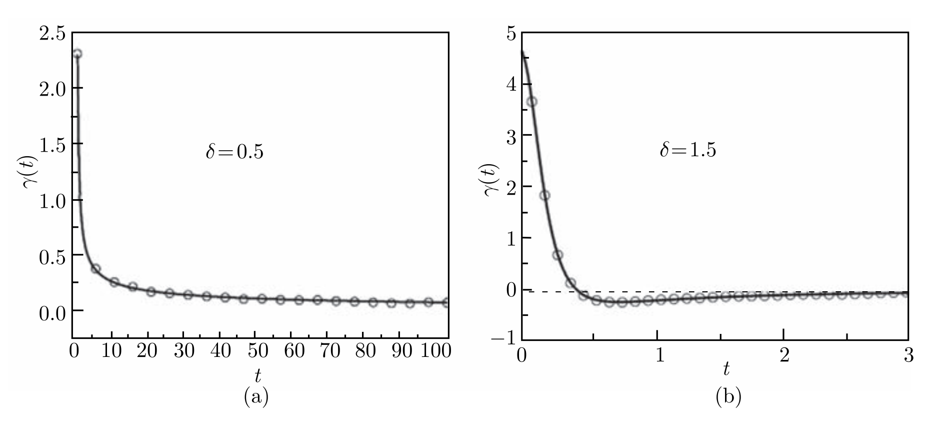


图 5.1 欠欧姆 ($\delta=0.5$) 和超欧姆 ($\delta=1.5$) 摩擦模型的阻尼核函数

实线和圆圈分别代表理论和模拟结果

为了得到粒子速度和坐标的前两次矩，需计算 $\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle$. 按照 Wiener-Khinchin 定理，有

$$\langle\xi(t)\xi(t')\rangle = 2k_{\mathrm{B}}T\eta_{\delta}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left(\frac{|\omega|}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\mathrm{c}}\left(\frac{|\omega|}{\omega_{\mathrm{c}}}\right)\cos\omega(t-t'), \tag{5.23}$$

从 (5.12) 式，我们推断出 (5.23) 式的双拉普拉斯变换 $\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle$ 为

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle = 2k_{\mathrm{B}}T\eta_{\delta}\frac{1}{z+z'}\int_{0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}\left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\mathrm{c}}\left(\frac{\omega}{\omega_{\mathrm{c}}}\right)\left(\frac{z}{z^2+\omega^2}+\frac{z'}{z'^2+\omega^2}\right). \tag{5.24}$$

阻尼核函数的拉普拉斯变换为

$$\hat{\gamma}(z) = 2\gamma_{\delta}\int_{0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}\left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\mathrm{c}}\left(\frac{\omega}{\omega_{\mathrm{c}}}\right)\frac{z}{z^2+\omega^2}. \tag{5.25}$$

因为 $0<\delta<2$，在 (5.24) 式和 (5.25) 式中令 $\omega_{\mathrm{c}}\to\infty$，则 $f_{\mathrm{c}}\to 1$，即使如此，被积函数高频衰减，因而积分存在，那么

$$\hat{\gamma}(z) = 2\gamma_{\delta}\int_{0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}\left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}\frac{z}{z^2+\omega^2}, \tag{5.26}$$

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle = 2k_{\mathrm{B}}T\eta_{\delta}\frac{1}{z+z'}\int_{0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{\pi}\left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}\left(\frac{z}{z^2+\omega^2}+\frac{z'}{z'^2+\omega^2}\right). \tag{5.27}$$

在以上两式中，对 ω 的积分解析积出，我们得到

$$\hat{\gamma}(z) = \gamma_{\delta}\left(\frac{z}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}\frac{1}{\sin(\delta\pi/2)}, \tag{5.28}$$

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle = k_{\mathrm{B}}T\eta_{\delta}\frac{1}{z+z'}\left[\left(\frac{z}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}+\left(\frac{z'}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}\right]\frac{1}{\sin(\delta\pi/2)}. \tag{5.29}$$

在这个状态下，为方便起见，可引入 δ 相关的频率 ω_{δ}：

$$\omega_{\delta}^{2-\delta} = \gamma_{\delta}\frac{1}{\tilde{\omega}^{\delta-1}}\frac{1}{\sin(\delta\pi/2)}, \tag{5.30}$$

利用这个记号，有

$$\hat{\gamma}(z) = \omega_{\delta}^{2-\delta}z^{\delta-1}, \tag{5.31}$$

$$\langle\hat{\xi}(z)\hat{\xi}(z')\rangle = k_{\mathrm{B}}Tm\omega_{\delta}^{2-\delta}\left(\frac{z^{\delta-1}+z'^{\delta-1}}{z+z'}\right). \tag{5.32}$$

5.1.3 粒子速度：一次时间特性

利用拉普拉斯变换，我们从 (5.15) 式得到

$$\langle v(t)\rangle = v_0\frac{1}{2\mathrm{i}\pi}\int_{c-\mathrm{i}\infty}^{c+\mathrm{i}\infty}\frac{1}{z+\hat{\gamma}(z)}\exp(zt)\mathrm{d}z, \tag{5.33}$$

环路积分中的常数 c 是实的，它的选取应使得 $\hat{K}(z)=1/[z+\hat{\gamma}(z)]$ 的所有奇点均位于积分路径的左侧. 代入 (5.31) 式的 $\hat{\gamma}(z)$，

$$\langle v(t)\rangle = v_0\frac{1}{2\mathrm{i}\pi}\int_{c-\mathrm{i}\infty}^{c+\mathrm{i}\infty}\frac{1}{z+\omega_\delta^{2-\delta}z^{\delta-1}}\exp(zt)\mathrm{d}z, \tag{5.34}$$

完成积分，有

$$\langle v(t)\rangle = v_0E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}]. \tag{5.35}$$

(5.35) 式表明了一个事实：平均速度朝着零弛豫，这个衰变是以 Mittag-Leffler 函数 $E_\alpha(x)$ 来进行的.

在大时间，即 $\omega_\delta t\gg 1$，平均粒子速度按照一个时间的幂律降低

$$\langle v(t)\rangle \simeq v_0\frac{(\omega_\delta t)^{\delta-2}}{\Gamma(\delta-1)},\quad 0<\delta<2,\quad \delta\neq 1. \tag{5.36}$$

在欧姆情况 $\delta=1$ 下，有 $\omega_{\delta=1}=\gamma$，(5.35) 式就是布朗粒子平均速度的标准指数衰减：

$$v(t)=v_0\exp(-\gamma t). \tag{5.37}$$

5.1.4 速度关联函数

粒子速度关联函数为

$$\begin{aligned}\langle v(t)v(t')\rangle =& \frac{k_\mathrm{B}T}{m}E_{2-\delta}[-(\omega_\delta|t-t'|)^{2-\delta}]\\ &+\left(v_0^2-\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\right)E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}]E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t')^{2-\delta}].\end{aligned} \tag{5.38}$$

正像预期的那样，二次时间速度关联函数 $\langle v(t)v(t')\rangle$ 包含了一个稳定部分和一个老化部分. 在欧姆情况 $(\delta=1)$ 下，方程 (5.38) 退化为

$$\langle v(t)v(t')\rangle = \frac{k_\mathrm{B}T}{m}\exp(-\gamma|t-t'|)+\left(v_0^2-\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\right)\exp[-\gamma(t+t')]. \tag{5.39}$$

我们已经注意到，如果对方程 (5.38) 中的初始速度进行平衡系综平均，则 $\langle v(t)v(t')\rangle$ 的老化部分消失. 这一点也能够通过用 t_i，进而令其取 $-\infty$ 来代替初始时刻而达到消除 $\langle v(t)v(t')\rangle$ 的老化项：

$$E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}]E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t')^{2-\delta}], \tag{5.40}$$

$$E_{2-\delta}\{-[\omega_\delta(t-t_i)]^{2-\delta}\}E_{2-\delta}\{-[\omega_\delta(t'-t_i)]^{2-\delta}\}$$

其的确在 $t_i \to -\infty$ 极限下消失. 在此极限下，平均速度的任何初始涨落在有限时间内衰变为零，以致粒子速度时时处在平衡态. 结果使得二次时间速度关联函数简化为它的稳定部分：

$$\langle v(t)v(t')\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}E_{2-\delta}[-(\omega_\delta|t-t'|)^{2-\delta}]. \tag{5.41}$$

感兴趣的是 $\langle v(t)v(t')\rangle$ 的稳定部分正比于 Mittag-Leffler 函数 $E_{2-\delta}[-(\omega_\delta|t-t'|)^{2-\delta}]$，而平均速度从一个给定的初始涨落按照 $E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}]$ 演化. 根据涨落依时间的衰变与平均值遵守同样的规律的事实，进而将回归定理①推广到了非欧姆情况.

在 $t=t'$ 特殊情况，我们有

$$\langle v^2(t)\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m} + \left(v_0^2 - \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\right)E_{2-\delta}^2[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}], \tag{5.42}$$

这描写了速度二次矩朝着平衡值慢演化的过程.

5.1.5 粒子位移的老化

从现在起，我们假设两时间速度关联函数简化为稳定部分，即粒子速度被热化. 那么，两时间位移关联函数能直接从关联函数 (5.21) 式的逆拉普拉斯变换而获得. 对于 $0 \leqslant t' \leqslant t$，有

$$\begin{aligned}\langle x(t)x(t')\rangle = &\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\left(t^2E_{2-\delta,3}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}] + t'^2E_{2-\delta,3}[-(\omega_\delta t')^{2-\delta}]\right.\\ &\left.-(t-t')^2E_{2-\delta,3}\{-[\omega_\delta(t-t')]^{2-\delta}\}\right).\end{aligned} \tag{5.43}$$

这里，我们用到了广义 Mittag-Leffler 函数 $E_{\alpha,\beta}(x)$. 推导 (5.43) 式的另一种方法是计算双重积分

$$\langle x(t)x(t')\rangle = \int_0^t\int_0^{t'}\langle v(t_1)v(t_2)\rangle \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2, \tag{5.44}$$

关联函数 $\langle v(t_1)v(t_2)\rangle$ 取 (5.38) 式的形式. 我们得用积分公式：

$$\int_0^t E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t_1)^{2-\delta}]\mathrm{d}t_1 = tE_{2-\delta,2}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}] \tag{5.45}$$

和

$$\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}E_{2-\delta}[-(\omega_\delta t_2)^{2-\delta}]\mathrm{d}t_2 = t^2E_{2-\delta,3}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}]. \tag{5.46}$$

① 回归定理：粒子速度的平均和平方平均随时间变化的时间有关函数的形式一样.

方程 (5.43) 展示了粒子的位移不是一个能达到平衡态变量的事实. 当 $\delta=1$，我们可以回到以前的布朗运动结果：

$$\langle x(t)x(t')\rangle=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\eta}\left[2t'-\frac{1+\mathrm{e}^{-\gamma(t-t')}-\mathrm{e}^{-\gamma t}-\mathrm{e}^{-\gamma t'}}{\gamma}\right]\quad(0\leqslant t'\leqslant t).\tag{5.47}$$

其中，$\eta=m\gamma$.

5.1.6 等时关联函数和时间有关的扩散系数

在 $t=t'$ 特殊情况下，从方程 (5.43) 得到

$$\langle x^2(t)\rangle=2\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}t^2E_{2-\delta,3}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}];\tag{5.48}$$

时间有关的扩散系数定义为

$$D(t)=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x^2(t)\rangle,\tag{5.49}$$

即

$$D(t)=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}tE_{2-\delta,2}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}].\tag{5.50}$$

在欧姆情况 $\delta=1$ 下，(5.48) 式和 (5.50) 式退化到标准的公式：

$$\langle x^2(t)\rangle=2\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m\gamma}t\tag{5.51}$$

和

$$D(t)=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m\gamma}(1-\mathrm{e}^{-\gamma t}).\tag{5.52}$$

在大时间 $\omega_\delta t\gg1$ 下，(5.48) 式和 (5.50) 式为

$$\langle x^2(t)\rangle=2\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{1}{\omega_\delta^2}\frac{(\omega_\delta t)^\delta}{\Gamma(\delta+1)}\tag{5.53}$$

和

$$D(t)=\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{1}{\omega_\delta}\frac{(\omega_\delta t)^{\delta-1}}{\Gamma(\delta)}.\tag{5.54}$$

(5.53) 式和 (5.54) 式显示，在 $\omega_\delta t\gg1$ 极限下，对于 $0<\delta<1$，粒子运动是欠扩散；对于 $1<\delta<2$，粒子运动是超扩散，如图 5.2 所示. 基于这一事实，$\langle x(t)x(t')\rangle$ 的公式 (5.43) 显示欠扩散和超扩散粒子的位移是一个老化变量，这与正常扩散情况一样.

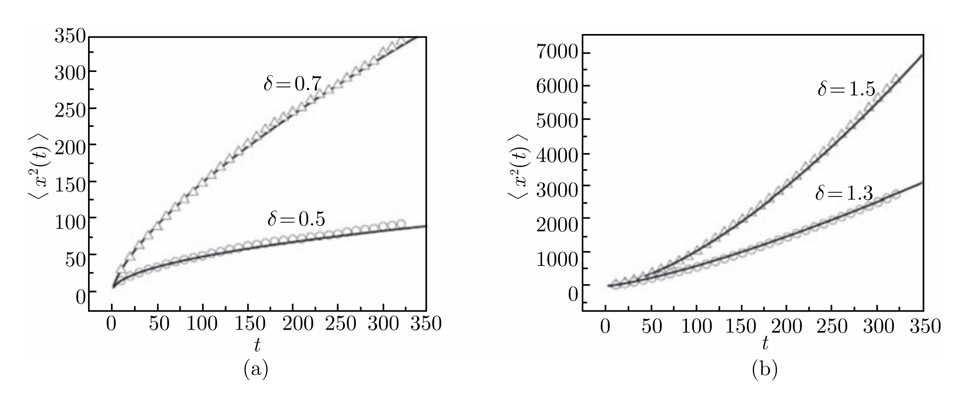


图 5.2 欠欧姆 ($\delta = 0.5, 0.7$) 和超欧姆 ($\delta = 1.3, 1.5$) 模型下，自由粒子的方均位移随时间的变化

实线和空心三角与圆圈分别代表理论和模拟结果

5.2 涨落与耗散之比

粒子位移不是一个能平衡的变量，一个修正的涨落耗散定理写作

$$\chi_{xx}(t,t') = \beta\Theta(t-t')X(t,t')\frac{\partial\langle x(t)x(t')\rangle}{\partial t'}, \tag{5.55}$$

其中，$\chi_{xx}(t,t')$ 是位移响应函数. 对于一个扩散粒子，涨落与耗散之比 $X(t,t')$ 用时间有关的扩散系数 $D(\tau)$ 和 $D(t_w)$ 来表示，这里 $\tau = t - t'$ 代表观测时间，$t_w = t'$ 为老化时间，

$$X(\tau,t_w) = \frac{D(\tau)}{D(\tau)+D(t_w)}. \tag{5.56}$$

用上述已发现的时间有关扩散系数的 (5.50) 式，得到

$$X(\tau,t_w) = \frac{\tau E_{2-\delta,2}[-(\omega_\delta\tau)^{2-\delta}]}{\tau E_{2-\delta,2}[-(\omega_\delta\tau)^{2-\delta}] + t_w E_{2-\delta,2}[-(\omega_\delta t_w)^{2-\delta}]}. \tag{5.57}$$

当 $\delta = 1$，回到以前的结果：

$$X(\tau,t_w) = \frac{1-\mathrm{e}^{-\gamma\tau}}{2-\mathrm{e}^{-\gamma\tau}-\mathrm{e}^{-\gamma t_w}}. \tag{5.58}$$

在大观测和等待时间 (即 $\omega_\delta\tau \gg 1$，$\omega_\delta t_w \gg 1$) 下，我们用 (5.54) 式给出的 $D(\tau)$ 和 $D(t_w)$ 的渐进表达式以及 (5.56) 式的定义，在指数为 δ 的欠欧姆和超欧姆模型中，大时间老化区，涨落与耗散之比为

$$X(\tau,t_w) \simeq \frac{1}{1+(t_w/\tau)^{\delta-1}}. \tag{5.59}$$

令人感兴趣的是 $X(\tau, t_w)$ 为一个用 δ 参数化的 t_w/τ 的函数. 对于 $\delta = 1$，$X = \dfrac{1}{2}$；对于任何其他 δ 值，极限 $\tau \to \infty$ 和 $t_w \to \infty$ 并不能互相交换.

5.3 倾斜周期势中的反常输运

倾斜周期势中的布朗输运模型可以用来描写很多实际的物理问题，如约瑟夫森结、电荷密度波、超离子导体、外势场中的偶极子旋转、锁相环和同步现象、表面扩散、利用电泳分离粒子等. 这类系统的性质被讨论了，如温度、倾斜力以及势形状对扩散系数和输运相干程度的影响；在弱噪声情况下，有效扩散系数被放大，输出对噪声和信号的强烈响应. 以往对倾斜周期势中粒子输运问题的研究大都在欧姆阻尼的框架内，尚无工作来研究非欧姆记忆阻尼情况. 事实上，很多随机过程都不是马尔可夫过程. 本节用蒙特卡罗方法对非欧姆阻尼环境中粒子的扩散系数进行计算.

5.3.1 动力学模型

考虑一个处于非欧姆阻尼环境中受常量外力作用的粒子在一维周期势中的扩散，其运动满足广义朗之万方程，其中热色噪声的谱密度为非欧姆形式，即 (5.22) 式，倾斜周期势为

$$U(x) = -U_0 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} x\right) - Fx. \tag{5.60}$$

当倾斜力 F 大于临界值 $F_c = U_0 2\pi/\lambda = 1.0$ 时，$U(x)$ 的局域极小消失，势的形式如图 5.3 所示. 计算中采用无量纲单位 $m = 1$ 和 $k_B = 1$，其他参数取值为：$U_0 = 1.0$，$\lambda = 2\pi$，$\gamma_\delta = 4.0$，选择光滑的截断函数 $f_c = \exp(-\omega/\omega_c)$，其中 $\omega_c = 4.0$. 模拟广义朗之万方程采用的时间步长为 $\Delta t = 0.01$，实验粒子数 $N = 20000$，即用很多个实验粒子来刻画一个粒子的统计行为.

这里感兴趣的物理量是分数阶扩散系数和分数阶迁移率. 在正常情况下，粒子的扩散系数和迁移率定义为

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}\langle \Delta x^2(t)\rangle}{\mathrm{d}t}, \tag{5.61}$$

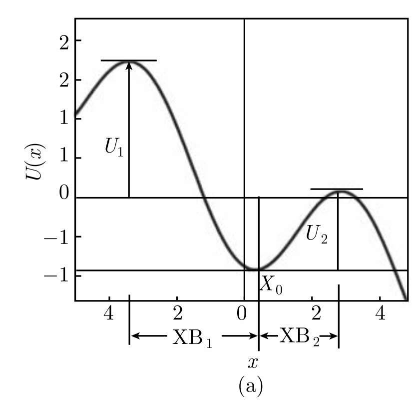
$$\mu_r = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{F} \frac{\mathrm{d}\langle x(t)\rangle}{\mathrm{d}t}. \tag{5.62}$$

利用黎曼–刘维尔分数阶导数的定义，我们将以上定义推广到非欧姆反常扩散情况：

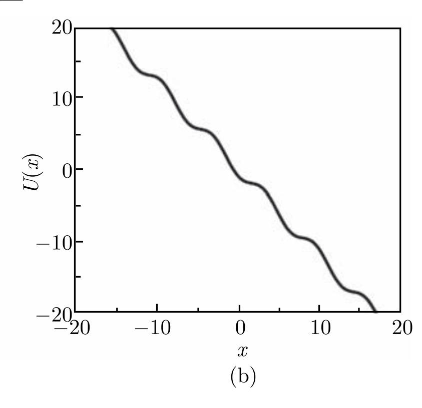
$$D^{(\delta)} := \lim_{t\to\infty} \frac{1}{\Gamma(1+\delta)} {}_0D_t^{\delta} \langle \Delta x^2(t) \rangle_{\delta}, \tag{5.63}$$

$$\mu_{\delta} := \lim_{t\to\infty} \frac{1}{F \sin\left(\dfrac{\delta\pi}{2}\right)} {}_0D_t^{\delta} \langle x(t) \rangle_{\delta}. \tag{5.64}$$

用数值计算分数阶导数就可以确定出这两个量.



(a)



(b)

图 5.3

(a) $F < F_c$ 时的倾斜周期势; (b) $F > F_c$ 时的倾斜周期势

5.3.2 欧姆阻尼情形下的波包劈裂

首先研究欧姆阻尼情形，图 5.4 给出了有效扩散系数 D_{eff} 与自由扩散系统 D_0 之比随倾斜力 F 的变化. 从中可见，在临界力 F_c 附近，有效扩散系数存在一个极大值，温度越低这种峰值现象越明显. 有效扩散系数呈现非单调变化，这表明存在一种扩散放大机制，意味着噪声与倾斜周期势之间存在协作效应，导致粒子扩散比自由情形的快.

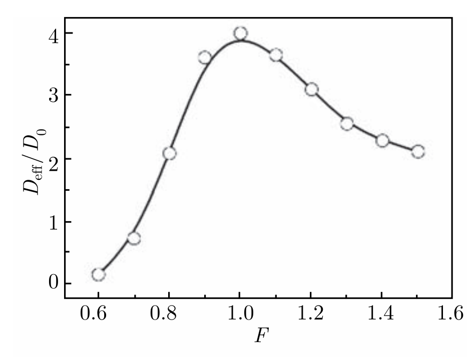
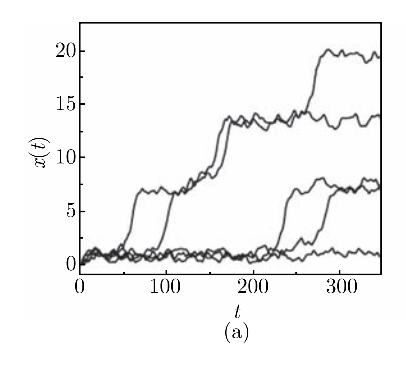


图 5.4 有效扩散系数 D_{eff} 与自由扩散系数 D_0 之比随倾斜力 F 的变化

让我们分析这种扩散被放大机制. 由于周期势中的粒子在确定性外力的作用下远离平衡态，所以细致平衡原理不成立，粒子沿着倾斜力的方向漂移和扩散. 如果阻尼很大且没有噪声，那么粒子将缓慢地移动. 此时，若总势场存在局域极小，粒子将到达这些位置并被束缚在该位置附近，这种状态被称为“锁定”态. 若总势场不存在局域极小，则粒子将沿着倾斜力方向运动，这种状态被称为“迁移”态. 对于存在涨落的情况，粒子不会一直处于“锁定”态，它们会被“踢”出势阱并向着附近较低的势阱迁移. 当倾斜力 $F = F_{\mathrm{c}}$，我们追踪 5 个实验粒子，在图 5.5(a) 中画出了它们的位置 $x(t)$ 随时间的演化. 从中看出实验粒子受到正向倾斜力的驱动而向前运动，但在总势能取极小值的区域 $x_n = 2n\pi + \pi/2$ 附近，粒子有较长时间的停留. 如果对大量粒子做统计，就可以发现粒子空间分布由于倾斜周期势的作用而劈裂成许多小波包，且劈裂生成的次级波包的中心位置均出现在 x_n 附近，如图 5.5(b) 所示.



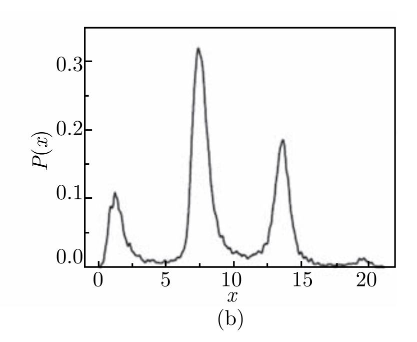


图 5.5

(a) 任意选取的五个实验粒子位置 $x(t)$ 随时间的演化; (b) 经过一段时间的演化以后 $(t = 50)$，粒子的空间概率分布

当 $F \ll F_{\mathrm{c}}$，总势如图 5.3(a) 所示. 若温度很低，则粒子很难翻越势垒 U_1 和 U_2，其处于“锁定”态. 反之，当 F 很大，粒子将容易通过 x_n 而处于“迁移”态. 这两种情况下粒子空间分布波包都是集中而不劈裂的，因此粒子扩散较慢. 从而导致 D_{eff} 随 F 非单调变化.

5.3.3　欠欧姆阻尼情形下的准周期振荡现象

Goychuk 和 Hänggi(Goychuk et al，2007) 应用 GLE 和分数阶福克尔–普朗克方程两种方法研究了欠欧姆阻尼系统的逃逸动力学过程，并对两种方法得到的结果进行了比较. 由于逃逸速率与势垒高度和温度有关，因此对于倾斜力 F 小于临界力 F_{c} 的情况，如果势垒高度与温度的比值太大，在数值模拟的时间窗口内，几乎观察不到粒子的逃逸行为，即大部分试验粒子都被束缚在“锁定”态. 因此，我

们将考虑倾斜力较大的情况. 以 $F = 5.0$ 和 $\delta = 0.6$ 的情况为例，图 5.6 绘出了粒子方均位移随时间的演化，呈现出准周期振荡行为. 当粒子的方均位移变化一个准周期，其平均位置沿着倾斜力方向向前移动了一个空间周期长度 $\Delta x = 2\pi$.

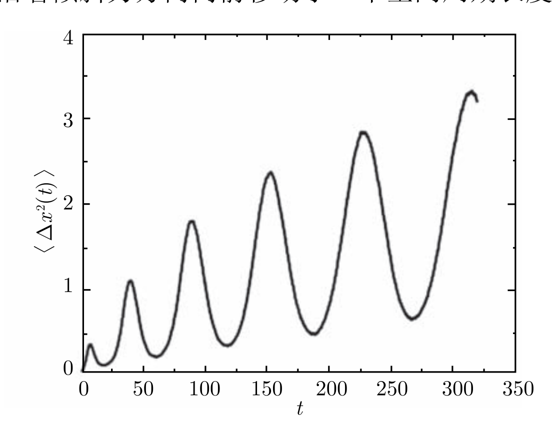


图 5.6　粒子的方均位移随时间的演化. 所用参数为：$\delta = 0.6$，$F = 5.0$，$T = 0.1$

对这种准周期振荡现象作如下的分析.

(1) 当粒子经过势垒顶部时，其空间分布波包周期性地展宽；当粒子到达势阱底部时，其分布波包周期性地变窄. 粒子的空间分布波包集中而不劈裂，这一点与正常欧姆阻尼情况不同.

(2) 欠欧姆阻尼粒子对初始位置有着强记忆，因此扩散过程缓慢. 如果倾斜周期势存在局域极小，那么粒子将很难从势阱中逃逸出来，几乎所有的实验粒子都处于“锁定”态. 若增加倾斜力直至势的局域极小消失，则在倾斜力的作用下粒子进入“迁移”态，其空间分布波包的宽度在势场周期结构的调制下出现准周期的振荡.

(3) 准周期振荡行为随着温度的升高而变得不明显. 当 $T > 1.0$ 时，准周期振荡消失，这是因为温度升高使粒子的运动速度加快，从而降低了势的结构对输运过程的影响.

5.3.4　超欧姆阻尼情形下的态转换

在超欧姆阻尼情形下，我们的数值结果发现粒子的渐进方均位移与时间满足幂函数关系：

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = 2D_{\rm eff}^{(\delta)} t^{\delta_{\rm eff}(T,F)}, \tag{5.65}$$

其中，有效扩散指数 $\delta_{\rm eff}$ 与 T 和 F 皆有关.

图 5.7 画出了不同 δ 情况下，有效扩散指数 $\delta_{\rm eff}$ 随 F 的变化. 从中可见，减小 δ，则 $\delta_{\rm eff}$ 的峰值向着 F 增大的方向移动. 与欧姆阻尼和欠欧姆阻尼两种情形根本

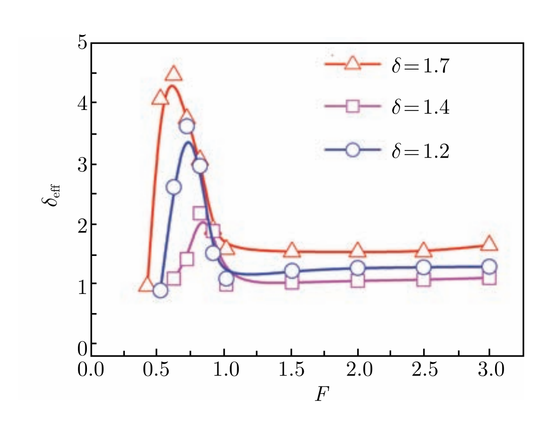


图 5.7　不同 δ 下的有效扩散指数随 F 的变化，其中 $T = 0.1$

不同，超扩散的 $\delta_{\rm eff}$ 并不总等于 δ，而是随 F 的增加呈现非单调变化. 对于 F 较大但仍满足 $F \sim F_{\rm c}$ 的情况，有效扩散指数 $\delta_{\rm eff}$ 甚至超过了 2. 这是一个十分新奇的结果，因为扩散指数等于 2 对应着弹道扩散，即自由热扩散的极限. 很显然，这是一种强烈的非平衡效应.

根据逃逸理论，如果势垒高度比温度大，粒子将不发生跨越多个位垒的长跳跃. 因此，当倾斜力足够小时，$\delta_{\rm eff} = 1$，将超扩散系统置于周期势中，其将变为正常扩散；若 F 很大，则周期势的结构消失，所有实验粒子都进入“快速迁移”态，此时 $\delta_{\rm eff} = \delta$. 而对于中等大小的倾斜力 ($F \sim F_{\rm c}$)，一部分实验粒子被束缚在势阱中，处于“锁定”态，逃逸出来的实验粒子则由于倾斜力的加速而处于“快速迁移”态. 当处于“锁定”态和“快速迁移”态的实验粒子满足一定比例时，有效扩散指数出现极大值. 显然，升高 T 和 δ 有利于处于“锁定”态的粒子逃逸出势阱而进入“快速迁移”态. 因此，对于某一确定的 $\delta > 1$，温度越高，$\delta_{\rm eff}$ 的极大值对应的 F 越小；而对于某一确定的低温，δ 越小，$\delta_{\rm eff}$ 的极大值对应的 F 越大.

图 5.8 给出了在 $\delta = 1.7$、低温 ($T = 0.1$)、中等倾斜力 ($F = 0.75$) 的情况下，两种运动模式的共存与转化. 如图 5.3(a) 所示，对于倾斜周期势中的某个势阱而言，其向左和向右的势垒高度分别为

$$U_1 = 2U_0\sqrt{1-\left(\frac{F\lambda}{2\pi U_0}\right)^2} + \frac{F\lambda}{\pi}\arcsin\left(\frac{F\lambda}{2\pi U_0}\right) + \frac{F\lambda}{2},$$

$$U_2 = 2U_0\sqrt{1-\left(\frac{F\lambda}{2\pi U_0}\right)^2} + \frac{F\lambda}{\pi}\arcsin\left(\frac{F\lambda}{2\pi U_0}\right) - \frac{F\lambda}{2}. \tag{5.66}$$

当温度足够低 ($T < U_2 \ll U_1$)，粒子主要在势阱中振荡，仅有一个很小的翻越势垒的逃逸概率. 低温下粒子的位垒逃逸过程非常慢，处于“锁定”态中的粒子分布近

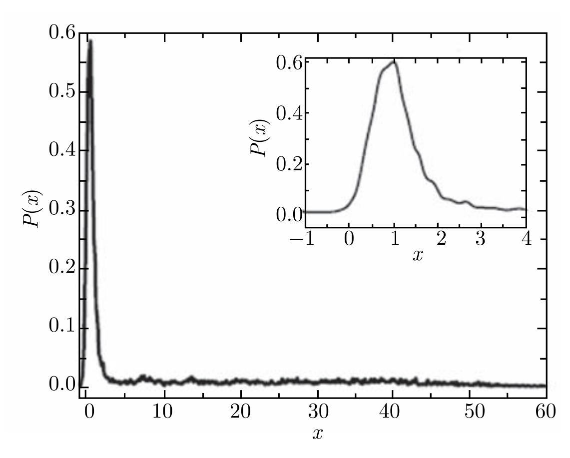


图 5.8 粒子在 $t = 50.0$ 时的空间分布. 其中处于“锁定”态的粒子被单独画在了右上角的小图中. 模拟中参数取值为: $\delta = 1.7$、$F = 0.75$、$T = 0.1$

似为中心位置处于 $x_0 \left[x_0 = \dfrac{\lambda}{2\pi}\arcsin\left(\dfrac{F\lambda}{2\pi U_0}\right)\right]$ 的高斯型, 如图 5.8 内图所示. 沿着倾斜力的方向势垒的高度逐渐降低, 从势垒中逃逸出来的粒子在倾斜力作用下, 所获得的动能比阻尼耗散掉的能量大, 其一旦越过势垒, 将不再被其他势阱束缚而进入“快速迁移”态. 在图 5.5(a) 中, 我们画出了 5 个实验粒子的位置随时间的演化. 可以看出在模拟的时间内, 有 4 个实验粒子先后从“锁定”态中逃逸出来, 并沿着倾斜力方向漂移, 进入“快速迁移”态. 而有 1 个实验粒子在模拟的时间窗口内始终被束缚在“锁定”态. 这与欧姆阻尼环境中粒子的输运过程不同, 导致了粒子在空间的分布出现一个长尾巴而不是被劈裂成许多个小波包, 如图 5.8 所示.

图 5.9(a) 和图 5.9(b) 绘出了粒子在 $t = 150$ 和 $t = 330$ 两个时刻的速度分布, 可见它们不满足玻尔兹曼速度分布. 这进一步说明了两种运动模式的共存与转化,

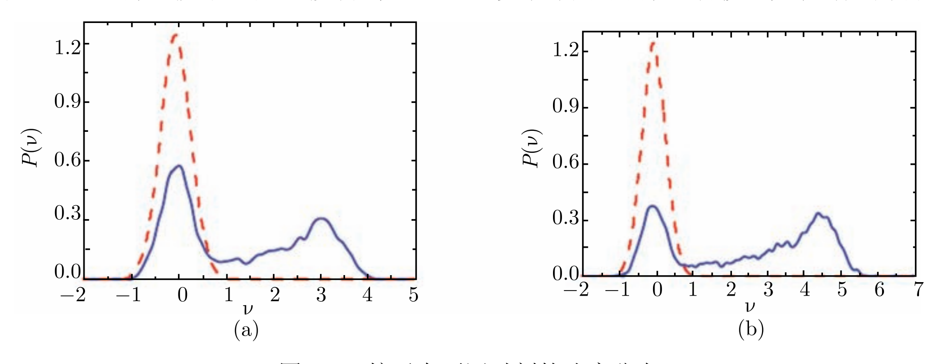


图 5.9 粒子在不同时刻的速度分布

(a) $t = 150$; (b) $t = 330$; 其中实线和虚线分别为 $\delta = 1.7$ 和 $\delta = 1.0$ 的情况; 其他参数取为: $F = 0.75$, $T = 0.1$

是一种强烈的非平衡效应. 随着时间的推移, 超欧姆阻尼粒子由"锁定"态进入"快速迁移"态的数量逐渐增加, 而且处于"锁定"态中的粒子的平均速度与处于"快速迁移"态中的粒子的平均速度的差别逐渐变大. 这意味着只要粒子逃出势阱, 它将沿着倾斜力方向加速运动. 当然, 某些实验粒子仍处于"锁定"态是由于它们的逃逸速率非常小, 在模拟时间窗口内观察不到这些粒子翻越势垒. 当原有的"锁定"态消失以后, 相对于前面的"快速迁移"态将出现一个新的"锁定"态.

5.4 应用举例

广义朗之万方程描写的动力学过程满足久保第二涨落耗散定理, 即周围环境提供给系统的随机力与阻尼力并不是无关的, 这种运动称为非马尔可夫布朗运动, 也称广义布朗运动. 在 $0 < \delta < 2$ 的非欧姆摩擦情况下, 如果系统外加一个有界势, 那么系统长时间后将达到平衡分布. 这种情形下, 非欧姆记忆摩擦效应仅体现在暂态, 而若希望看到反常的结果, 则必须在非束缚势 (如自由场、倒筒谐势、周期势、亚稳势等) 中来考察系统的长时间行为.

5.4.1 反常热传导

考虑一个长为 L 的有限尺度热道, 其一端为温度为 T_0 的低温热源, 另一端为温度为 $T_1 = T_0 + \Delta T$ 的高温热源, 若温差 ΔT 较小, 则在热道中距离高温端 x 处的温度为

$$T(x) = T_1 - \frac{x}{L}(T_1 - T_0). \tag{5.67}$$

现有第 i 个载能子从高温热源出发, 到达低温端而停止, 则能量交换为 $Q_i = \mathrm{e}_i^{(\mathrm{in})} - \mathrm{e}_i^{(\mathrm{out})}$, 这里 $\mathrm{e}_i^{(\mathrm{in})}$ 和 $\mathrm{e}_i^{(\mathrm{out})}$ 分别为粒子与低温热源碰撞前后的动能. 其平均值近似由能量均分定理估计出: $\langle Q_i \rangle = \dfrac{1}{2}k_{\mathrm{B}}(T_1 - T_0) = \dfrac{1}{2}k_{\mathrm{B}}\Delta T$. 设载能子的平均输运时间为 t, 因此能流等于

$$J = \frac{\langle Q \rangle}{t}, \tag{5.68}$$

热传导系数定义为

$$\kappa = -\frac{J}{\nabla T}, \quad \nabla T = -\frac{\triangle T}{L}. \tag{5.69}$$

载能子在热道中的运动主要是扩散. 为了分析热传导系数对热道长度的依赖性, 现将载能子假设为一个非欧姆阻尼粒子, 其方均位移为

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = 2\frac{k_{\mathrm{B}}\bar{T}}{m}t^2 E_{2-\delta,3}[-(\omega_\delta t)^{2-\delta}], \tag{5.70}$$

其中，$\bar{T}$ 是平均温度. 按照平均首次通过时间的概念，粒子在热道中的扩散时间由上式中令左端等于 L^2 来获得.

(1) 如果热道的长度非常短，粒子的短时间扩散行为为弹道扩散 (正常扩散粒子也是如此)，即

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \simeq 2\frac{k_{\mathrm{B}}\bar{T}}{m\Gamma(3)}t^2, \tag{5.71}$$

则两端平均扩散时间等于

$$\langle t_{LR} \rangle = \left[\frac{m\Gamma(3)}{2k_{\mathrm{B}}\bar{T}}\right]^{1/2} L. \tag{5.72}$$

按照热传导系数的定义，有

$$\kappa = cL, \tag{5.73}$$

其中，c 是一个常量. 这意味着热传导系数随热道长度线性地增加.

(2) 如果热道的长度足够长，那么粒子的方均位移正比于时间的分数幂，即

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \simeq 2\frac{k_{\mathrm{B}}\bar{T}}{m}\frac{\omega_{\delta}^{\delta-2}}{\Gamma(1+\delta)}t^{\delta}, \tag{5.74}$$

平均扩散时间等于

$$\langle t_{LR} \rangle = \left[\frac{m\Gamma(1+\delta)}{2k_{\mathrm{B}}\bar{T}}\right]^{1/\delta} L^{2/\delta}. \tag{5.75}$$

故热传导系数为

$$\kappa = cL^{2-2/\delta}. \tag{5.76}$$

对于超扩散 ($\delta > 1$) 而言，这导致发散的结果；而对于欠扩散 ($\delta < 1$)，热传导系数随热道长度非单调地变化. 而在正常傅里叶热传导理论中，这个系数与热道长度无关，为一常量.

5.4.2 位垒通过问题

一个能量势垒将空间分成性质不同的两个区域. 假设一个粒子初始处于位垒的某一侧，其所处位置的势能与势顶部的差为 $-\Delta U$. 根据经典力学的知识，我们知道如果粒子具有一个朝着位垒顶部的初始速度，其对应的初始动能为 K_0，当 $K_0 > \Delta U$，那么粒子就能到达位垒的另一侧，从而获得“新生”；当 $K_0 < \Delta U$，粒子不能爬上势顶部，而沿原势一侧返回，这称为“复原”.

如果粒子处于一个具有摩擦和涨落的环境中，情况又是怎样呢？这一模型被称为位垒通过问题，其在许多领域有着重要的作用. 例如，分子系统的碰撞、原子团

簇、原子核熔合、亚稳力学系统等. 显然，扩散通过位垒的时间尺度依赖于势结构以及噪声性质. 一个重要的问题是：在自由状态下扩散快于或慢于正常扩散的系统，将其置于位垒附近，扩散帮助通过位垒还是破坏定向性呢？在著名的 Kramers 位垒逃逸问题中，粒子反复通过势能位垒，从而建立了一个准稳流. 这是因为亚稳势的一侧为反射边界，对于倒谐振子势而言，粒子通过位垒过程中，何量为定常呢？

1. 运动方程的解

描写粒子运动的广义朗之万方程为

$$m\ddot{x}(t)+m\int_0^t \mathrm{d}t'\gamma(t-t')\dot{x}(t')+U'(x)=\xi(t), \tag{5.77}$$

这里，$\xi(t)$ 为一个零平均高斯分布色噪声，它的关联函数与阻尼核函数满足：

$$\langle\xi(t)\xi(t')\rangle=mk_{\mathrm{B}}T\gamma(t-t')=2mk_{\mathrm{B}}T\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{J(\omega)}{\omega}\cos\omega(t-t'), \tag{5.78}$$

其中，k_{B} 是玻尔兹曼常量，T 为温度，$J(\omega)$ 代表热库提供的非欧姆摩擦谱密度函数，选作

$$J(\omega)=\gamma_\delta\left(\frac{\omega}{\omega_r}\right)^\delta. \tag{5.79}$$

在势垒附近，将势在其顶部泰勒展开，保留到二次项，进而形成一个倒谐振子势. 为方便起见，将坐标原点取在势垒顶部，则

$$U(x)=-\frac{1}{2}m\omega_b^2x^2. \tag{5.80}$$

粒子的初始分布为在位置 $x_0>0$ 和速度 $v_0<0$ 或 $x_0<0$ 和 $v_0>0$. 方程 (5.77) 的解能用拉普拉斯变换获得，因为噪声 ξ 满足一个高斯分布，并且该方程在 (5.80) 式之下是线性的，所以粒子的概率分布函数也应是高斯的，写作

$$W(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2(t)}}\exp\left(-\frac{[x-\langle x(t)\rangle]^2}{2\sigma_x^2(t)}\right), \tag{5.81}$$

其中, 时间有关的平均位置 $\langle x(t)\rangle$ 和方差 $\sigma_x^2(t)$ 为

$$\langle x(t)\rangle=\left[1+\omega_b^2\int_0^t \varPhi_\delta(t')\mathrm{d}t'\right]x_0+\varPhi_\delta(t)v_0, \tag{5.82}$$

$$\sigma_x^2(t)=2mk_{\mathrm{B}}T\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\,\varPhi_\delta(t-t_1)\varPhi_\delta(t-t_2)\gamma(t_1-t_2). \tag{5.83}$$

响应函数 $\varPhi_\delta(t)$ 的拉普拉斯变换为

$$\hat{\varPhi}_\delta(s)=\frac{1}{s^2+s\hat{\gamma}(s)-\omega_b^2}, \tag{5.84}$$

其中，$\hat{\gamma}(s)=\tilde{\gamma}_\delta s^{\delta-1}$ 为阻尼核函数的拉普拉斯变换，$\tilde{\gamma}_\delta=\gamma_\delta\omega_r^{1-\delta}\sin^{-1}(\delta\pi/2)$ 为有效摩擦强度.

应用留数定理，我们获得响应函数的完全表达式：

$$\varPhi_\delta(t)=\frac{\tilde{\gamma}_\delta\sin(\pi\delta)}{\pi}\int_0^\infty\frac{r^\delta\exp(-tr)\mathrm{d}r}{\rho^2+\tilde{\gamma}_\delta^2r^{2\delta}+2\rho\tilde{\gamma}_\delta r^\delta\cos(\pi\delta)}+R_\delta(t), \tag{5.85}$$

式中，

$$\rho=r^2-\omega_b^2,$$

$$R_\delta(t)=\begin{cases}\dfrac{\exp(a_Mt)}{2a_M+\delta\tilde{\gamma}_\delta a_M^{\delta-1}}, & 1<\delta<2,\\ \dfrac{1}{a_1-a_2}[\exp(a_1t)-\exp(a_2t)], & \delta=1,\\ \dfrac{\exp(a_Mt)}{2a_M+\delta\tilde{\gamma}_\delta a_M^{\delta-1}}+\varXi(t), & \delta_0<\delta<1,\\ \varXi(t), & 0<\delta<\delta_0,\end{cases} \tag{5.86}$$

其中，

$$\varXi(t)=\frac{\exp(at\cos\phi)}{4a^2+\delta^2}, \tag{5.87}$$

这里，a_M 为下列方程当 $\delta\neq1$ 的唯一正根，

$$s^2+\tilde{\gamma}_\delta s^\delta-\omega_b^2=0. \tag{5.88}$$

不过，当 δ 小于某个 $\delta_0<1$ 的值，将不存在 a_M；a_1 和 a_2 是方程 (5.88) 在 $\delta=1$ 的两个实根；当 $0<\delta<1$ 时，方程 (5.88) 有一对复根，写作 $s=a\exp(\pm\mathrm{i}\varphi)$，其中，$a>0$，$|\varphi|<\pi$. 将 s 的表达式代入方程 (5.88)，有

$$a^2\cos(2\varphi)+\gamma_\delta a^\delta\cos(\delta\varphi)-\varOmega^2=0, \tag{5.89}$$

$$a^2\sin(2\varphi)+\gamma_\delta a^\delta\sin(\delta\varphi)=0. \tag{5.90}$$

数值求解以上两个联立方程，便可获得 a 和 φ 的值.

图 5.10 画出了具有通过概率 $P=0.3$ 和 0.7 的两种粒子通过倒谐振子势位垒的分布密度函数随时间的演化. 从图中可见，分布密度函数处处呈现高斯状，而不是分居位垒两侧的双峰分布.

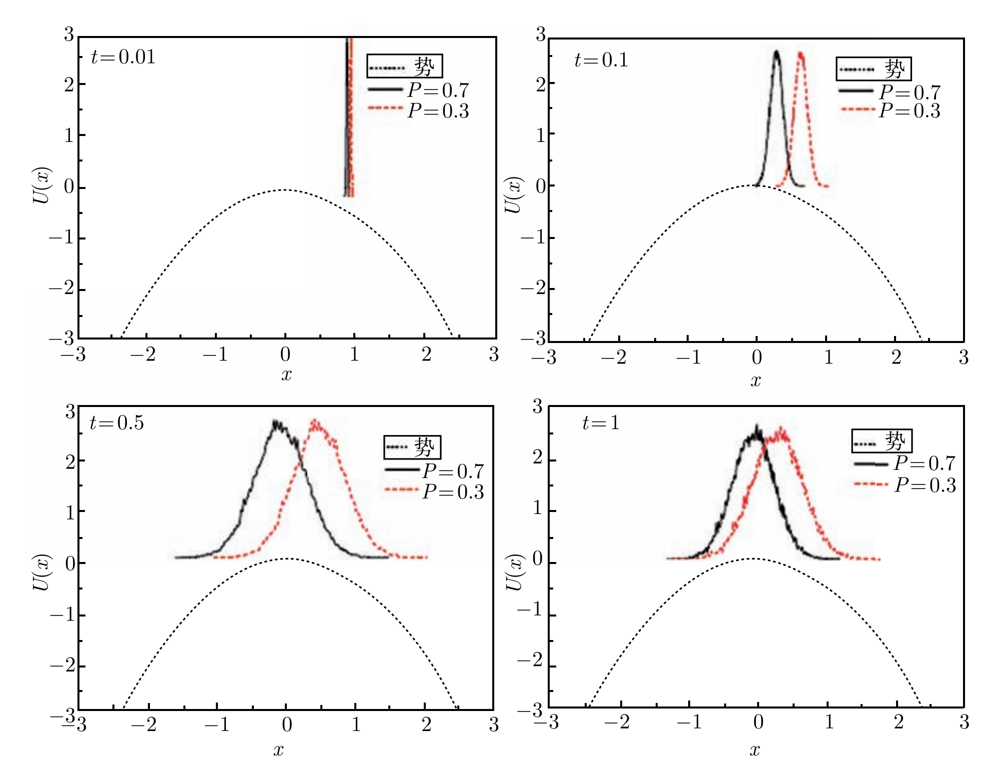


图 5.10　欧姆阻尼 ($\delta = 1.0$) 粒子通过一个倒谐振子势位垒的分布密度函数随时间的演化

2. 通过概率

通过势能位垒概率，即 t 时刻在势垒的另一侧 ($x \geqslant 0$) 发现粒子的总概率 (化学物理中称为特性函数) 定义为粒子概率密度函数从零到无穷的积分，

$$P(t; x_0, v_0) = \int_0^{\infty} W(x, t; x_0, v_0)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\mathrm{erf}\left(-\frac{\langle x(t)\rangle}{\sqrt{2}\sigma_x(t)}\right). \tag{5.91}$$

它可取 $0 \sim 1$ 的任何值. 长时间后通过概率趋于常数，这是因为比值 $\dfrac{\langle x(\infty)\rangle}{\sqrt{2}\delta_x(\infty)}$ 等于一个常数.

我们定义一个对应于粒子初始速度的临界动能，其使得通过概率 $P = \dfrac{1}{2}$. 从方程 (5.91) 知：这需要 $\langle x(t \to \infty)\rangle = 0$，那么由方程 (5.82) 得到

$$v_{0,\mathrm{c}} = -x_0 \lim_{t\to\infty} \frac{1 + \varOmega^2 \displaystyle\int_0^t \varPhi_\delta(t')\mathrm{d}t'}{\varPhi_\delta(t)} = -x_0 \frac{\varOmega^2}{a}, \tag{5.92}$$

临界动能为

$$K_{\mathrm{c}} = \frac{1}{2}mv_{0,\mathrm{c}}^2 = \lambda_\delta^2 B, \tag{5.93}$$

其中，$B = \dfrac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$ 是位垒顶部与粒子初始位置的势能差，耗散位垒放大因子定义为 $\lambda_\delta = 1/(a\Omega)$.

对于正常扩散，有

$$\lambda_1 = \frac{\gamma_1 + \sqrt{\gamma_1^2 + 4\Omega^2}}{2\Omega}; \tag{5.94}$$

对于 δ 接近 2 的超扩散，$\lambda_2 = \sqrt{1 + \gamma_{\delta\sim 2}}/\Omega^2 \gg \lambda_1$；可是对于 δ 接近零的欠扩散，$a^2 = \Omega^2 - \gamma_{\delta\sim 0} < 0$，在这种情况下，不存在一个临界初始动能.

3. 传输系数

兹考虑一个粒子在一个亚稳势中的翻越位垒运动，该势存在一个局域极小 (基态) 和一个局域极大 (位垒)，例如，$U(x) = \dfrac{1}{2}x^2 - \dfrac{1}{4}x^4$. 这就是著名的 Kramers 问题. 位垒逃逸速率以往是从福克尔–普朗克方程在局域简谐近似下解析获得的，但比较困难. 这里，我们用反应流方法推导速率常数. 初始条件被假设在势垒顶部，但计及粒子从更早的一个位置出发，经历了不同的随机历史的轨道平均. 反应速率常数定义为

$$\kappa(t) = \frac{\langle v_0 \delta(x_0) \theta_p [x(x_0, v_0, t)] \rangle}{\langle \theta_R(x_0) \rangle}, \tag{5.95}$$

其中，当 $x > 0$，$\theta_R[x(x_0, v_0, t)] = 1$，其他情况等于 0；而 θ_p 就是 $1 - \theta_R$.

粒子在 $t = 0$，从 $(x_0 = x_b, v_0)$ 出发，其中 x_b 为势垒坐标，粒子分布为平衡态分布，即

$$\begin{aligned} W(x_0, v_0) &= Z^{-1} \exp\left(-\frac{H(x_0, v_0)}{k_{\mathrm{B}}T}\right), \\ H(x_0, v_0) &= \frac{1}{2}m(\omega_b^2 x_0^2 + v_0^2). \end{aligned} \tag{5.96}$$

反应速率常数可表示为

$$\begin{aligned} \kappa(t) &= \frac{1}{\langle \theta_R(x_0) \rangle} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_0 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}v_0 W(x_0, v_0) v_0 \delta(x_0 - x_b) \chi(x_0, v_0, t) \\ &= \frac{m}{Qh} \int_{-\infty}^{\infty} v_0 \exp\left(-\frac{mv_0^2}{2k_{\mathrm{B}}T}\right) \chi(x_0 = x_b, v_0, t) \mathrm{d}v_0, \end{aligned} \tag{5.97}$$

其中，Q 为粒子在基态的配分函数，定义为 $Q = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} W_{\mathrm{st}}(x)\mathrm{d}x$. 当温度与玻尔兹曼常量的乘积远小于位垒高度，则粒子在基态阱的概率密度函数具有玻尔兹曼形式.

为了提取动力学对过渡态理论 (TST) 的修正，我们定义传输系数：

$$k(t) = \kappa(t) k^{\mathrm{TST}}. \tag{5.98}$$

将粒子概率分布，即方程 (5.91) 代入方程 (5.97)，得

$$\kappa(t) = \left[1 + \frac{m\sigma_x^2(t)}{k_\mathrm{B} T \varPhi_\delta^2(t)}\right]^{-1/2}. \tag{5.99}$$

注意：方程 (5.98) 在取长时间极限情况下，与克拉默斯逃逸速率公式一致.

这里和下面所有量均是无量纲的. 取参考频率 $\omega_r = 4.0$，阻尼系数 γ_δ 与 δ 无关，$\gamma_\delta = 4.0$. 图 5.11 显示了与时间有关的位垒通过概率，这里考虑两种初始速度，分别大于或小于正常位垒通过情形下的临界速度. 我们观测到了两种相反的位垒通过概率行为：当初始速度小时，热涨落帮助粒子通过位垒；当初始速度大时，涨落抑制粒子的位垒通过. 粒子的平均位置随时间平移，具有 $\mathrm{e}^{a_M t}$ 的形式. 对于 δ 接近 δ_0 的欠欧姆摩擦粒子 (这种情况下，a_M 为一非常小的正值)，经过一段时间，它将退回其原所在位垒的一侧，因为这种粒子具有很强的初始位置记忆. 这导致长时间通过概率消失为零.

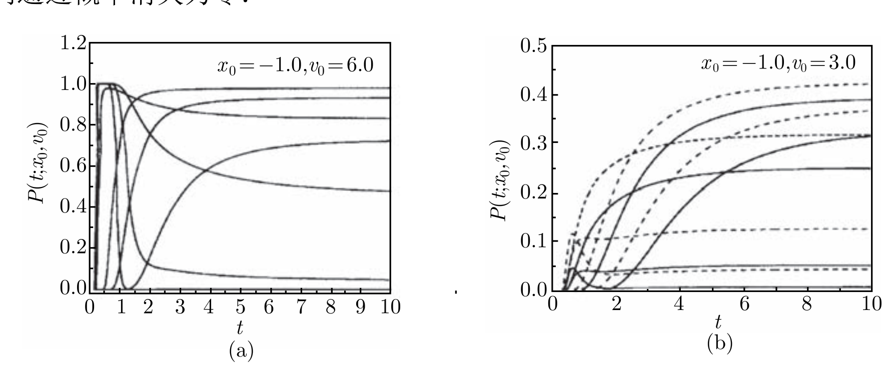


图 5.11　两种初始速度下粒子通过位垒概率随时间的变化

图 5.12 显示了不同 δ 值的时间有关的传输系数 $\kappa(t)$ 以及稳定传输系数 [(5.99) 式] 随 δ 的变化规律. 当 $t = 0$，$\kappa(0) = 1$，还没有通过位垒事件发生. 此后，$\kappa(t)$ 的值单调下降，直到某个时刻 t_b，$\kappa(t)$ 达到它的稳定值 κ_{st}. 一个重要的结果是：稳定传输系数随 δ 非单调地变化. 在大 δ 情况下，对应于 $P(t=\infty; x_0, v_0)$ 围绕着 $v_0 = 0$ 的区域就越大，概率就越接近于 1/2. 这意味着粒子有更多机会反复往返穿过位垒，使得传输系数下降；在小 δ 情况下，粒子具有一个初始位置的长记忆功能，这也不利于通过位垒.

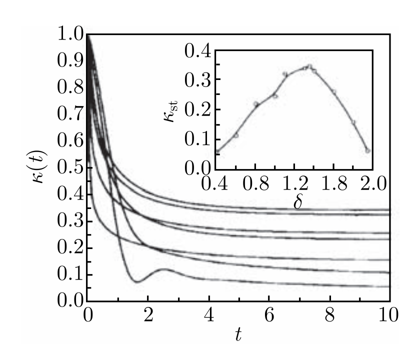


图 5.12 不同 δ 值的传输系数随时间的演化

讨论

(1) 一个描写不对称漂移与扩散行为的重要量是 Pe 数，定义为

$$Pe = \lim_{t\to\infty} \frac{\langle x(t)\rangle}{\sqrt{2}\sigma_x(t)}. \tag{5.100}$$

在欠扩散情况下，$Pe \leqslant 0$; 对于正常扩散，

$$Pe = \frac{\Omega^2 x_0 + \varepsilon v_0}{(2k_{\mathrm{B}}T\gamma_1\varepsilon/m)}, \tag{5.101}$$

其中，$\varepsilon = (\sqrt{\gamma_1^2 + 4\Omega^2} - \gamma_1)/2$.

(2) 超前峰 (overshooting)：欠欧姆摩擦区 ($0 < \delta < 1$)，粒子通过位垒之前，它的概率密度分布宽度随时间的增长慢于粒子平均位置随时间的增长，经过一段时间后，通过概率随分布宽度的增加而降低，这表明一个回流穿过了位垒.

5.4.3 棘轮整流反常扩散

1. 布朗马达

费恩曼 (Feynman) 构思的棘轮与掣爪同时与温度不等的两个热源相接触. 迄今，费恩曼棘轮与掣爪装置并没有在实验上实现. 这是因为欲显示热涨落所发挥的重要作用，这个装置必须在一个非常小的尺度上造出. 文献 (Magnasco, 1998) 给出了定量估计，结果表明为了达到一个合适的棘轮效应，所需的温差在实验上是不适宜的. 不过，将棘轮和掣爪一侧的温度选为与叶片的温度一样时，可在棘轮系统上附加一个零偏压外部驱动，这在实验上是可行的. 从而引发了后续大量的关于定向运动和对外做功的理论和实验研究，尤其是这与分子马达有关，系最近二十年来非平衡态统计物理最为活跃的研究课题. 布朗马达 (布朗粒子受非平衡驱动在不对称周期势中的定向运动) 模型分为三大类：摇摆棘轮 (rocking ratchet)、闪烁棘轮 (flashing ratchet) 和关联棘轮 (correction ratchet). 模型归结为一个过阻尼布朗粒

子在一个不对称周期势中的随机运动，即

$$\gamma\dot{x}(t) = -\frac{\partial}{\partial x}V(x,t) + \xi(t), \tag{5.102}$$

$\xi(t)$ 是一个平均值等于零的噪声，系统无偏压的标志是

$$\int_t^{t+T} \mathrm{d}t' \int_0^L \mathrm{d}x' \frac{\partial V(x',t')}{\partial x'} = 0. \tag{5.103}$$

常用的不对称周期势 (也称棘轮势) 为

$$U(x) = U_0[\sin(2\pi x/L) + 0.25\sin(4\pi x/L)]; \tag{5.104}$$

$$U(x) = \begin{cases} \dfrac{U_0}{\alpha L}x, & nL \leqslant x < (n+\alpha)L; \\ \dfrac{U_0}{(1-\alpha)L}(L-x), & (n+\alpha)L \leqslant x < (n+1)L. \end{cases} \tag{5.105}$$

在无外部净偏压的前提下，布朗马达稳定工作所需的条件是：局部或暂时的时空不对称和非平衡涨落的结合. 让我们简单分析三种模型产生定向流的机制.

(1) 摇摆棘轮：与时间有关的势为 $V(x,t) = U(x) + A\sin(\omega t)x$. 若选 (5.104) 式作为棘轮势，见图 5.13. 在一个空间周期内，相对于势能极小点，势朝着右侧的坡比左侧的平缓. 那么向上倾斜的势垒高度大于向下倾斜的，故在相同倾斜角的情况下，粒子向右的平均速度大于向左的，故在一个信号周期内，粒子的净流不等于零且向右. 图 5.14 给出了流相反的工作情况，那里选用的棘轮势是 (5.105) 式，其中 $0 < \alpha < 0.5$.

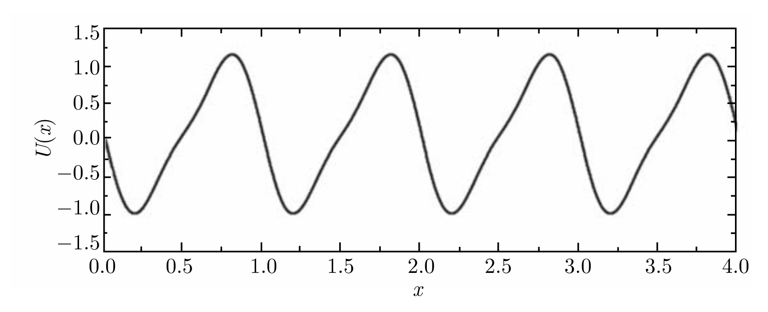


图 5.13 由方程 (5.104) 画出的一个光滑不对称周期势 (棘轮势)

(2) 闪铄或涨落棘轮：$V(x,t) = z(t)U(x)$，这里 $z(t)$ 随机或周期性地取 0 和 1 两个值. $z(t) = 0$ 表示势脱离，粒子自由扩散；$z(t) = 1$ 意味着势存在，它将原来的波包切割成一些小的子波包. 由于棘轮势在一个周期内的不对称性，距无势时分布中心较近的陡边一侧势阱得到的尾巴分布较多，见图 5.15. 从而粒子向陡势方向运动，粒子平均速度与摇摆棘轮的情况相反.

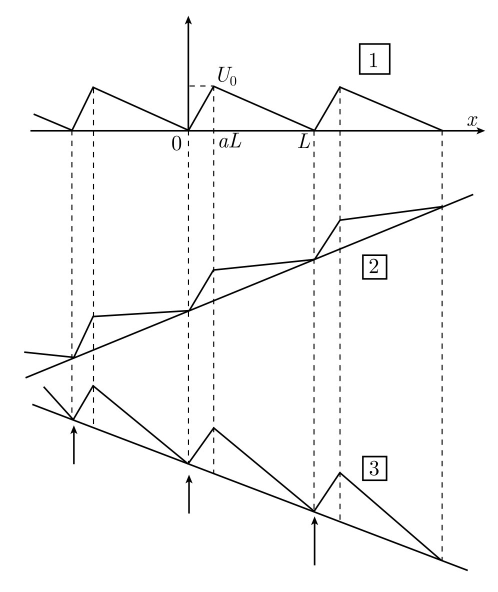


图 5.14 摇摆棘轮示意图

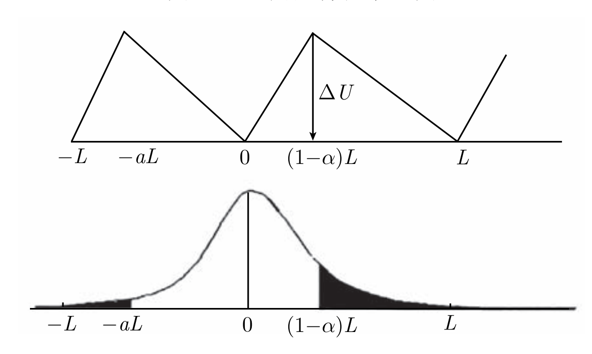


图 5.15 闪烁棘轮诱发粒子定向运动示意图

(3) 关联棘轮：用一色噪声 $\varepsilon(t)$ 驱动朗之万方程，例如，“红”噪声，其关联函数为 $\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle = D\tau_c^{-1}\exp[-(t-t')/\tau_c]$，其中 D 为扩散系数，τ_c 称为噪声关联时间. 色噪声与非线性势耦合的效应为加性 (常量强度)色噪声等价于一个乘性 (坐标有关的强度) 白噪声，即 $\dot{x} = -U'(x)+g(x)\xi(t)$，两边同除 $g(x)$ 并令 $y = \displaystyle\int^x \mathrm{d}x'/g(x')$，那么新方程 $\dot{y} = -U_1'(y) + \xi(t)$ 中的势变为 $U_1(y) = \displaystyle\int^y U'(y')\mathrm{d}y'/g(y')$，其就成为一个倾斜的“搓衣板”，粒子在这样的势中存在定向流是必然的.

布朗马达不是去抑制布朗运动，而是利用永不停止的噪声源去有效、可靠地定向、分离、泵抽、驾驭不同的自然自由度. 许多研究者对基本的棘轮模型进行了组合和推广，例如，惯性棘轮、温度棘轮、旅行棘轮、耦合棘轮、量子棘轮、相对论棘

轮等，可见两篇综述性文章 (Hänggi, 2009; Reimann, 2002).

2. 涨落棘轮和概率流

一个粒子在一个非欧姆记忆阻尼环境中运动，同时又承受一个在 $U_1 = 0$ 和 $U_2 = U(x)$ 之间周期涨落的势的作用. 这是讨论分子马达工作原理的一种理论模型. 我们用如下的广义朗之万方程描写粒子的运动：

$$m\ddot{x} = -m\int_0^t \gamma(t-s)\dot{x}(s)\mathrm{d}s - z(t)U'(x) + \varepsilon(t), \tag{5.106}$$

这里 $z(t)$ 是一个周期二分过程，即

$$z(t) = \begin{cases} 0, & n\tau < t < n\tau + \tau_{\text{off}}; \\ 1, & n\tau + \tau_{\text{off}} < t < (n+1)\tau, \end{cases} \tag{5.107}$$

式中，$\tau = \tau_{\text{off}} + \tau_{\text{on}}$ 为一个循环时间周期，τ_{off} 和 τ_{on} 分别是势脱离和恢复的寿命，阻尼核的形式仍然选择非欧姆摩擦，见 (5.22) 式.

棘轮势由两个斜率不同的双线性势组成：

$$U(x) = \begin{cases} \dfrac{U_0}{(1-\alpha)L}x, & nL < x < (n+1-\alpha)L; \\ \dfrac{U_0(L-x)}{\alpha L}, & (n+1-\alpha)L < x < (n+1)L, \end{cases} \tag{5.108}$$

式中，U_0 为势垒高度，α 和 L 为棘轮势的不对称参数和周期长度.

当势脱离时，我们考察位于 $x = 0$ 处的粒子向两侧的扩散情况. 即 $z(t) = 0$，粒子发生自由扩散，分布密度函数为高斯型，也就是

$$W(x,t) = \frac{W_0}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2(t)}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2(t)}\right), \tag{5.109}$$

这里前置因子 W_0 的意义在于，经过多次势脱离与恢复操作以后，仍位于 $x=0$ 附近的粒子数目为 NW_0. 粒子的方均位移为

$$\sigma_x^2(t) = \frac{2k_{\mathrm{B}}T}{m}t^2E_{2-\mu,3}(-\gamma_\mu t^{2-\mu}) \underset{t\to\infty}{\sim} \frac{2k_{\mathrm{B}}T}{m\gamma_\mu}\frac{t^\mu}{\Gamma(1+\mu)}, \tag{5.110}$$

这里，μ 有关的摩擦系数 γ_μ 与正常扩散媒体的摩擦系数 γ_1 的关系为

$$\gamma_\mu = \gamma_1 \sin^{-1}(\mu\pi/2). \tag{5.111}$$

经过 τ_{on} 时间，在 $(1-\alpha)L$ 右侧发现粒子的概率为

$$P_f = \int_{(1-\alpha)L}^{\infty} W(x,\tau_{\text{off}})\mathrm{d}x; \tag{5.112}$$

在 $-\alpha L$ 左侧发现粒子的概率为

$$P_b = \int_{-\infty}^{-\alpha L} W(x, \tau_{\text{off}}) \mathrm{d}x. \tag{5.113}$$

则净概率漂移等于

$$P_f - P_b = \frac{1}{2}\left[\operatorname{erf}\left(\frac{(1-\alpha)L}{\sqrt{2}\sigma_x(\tau_{\text{off}})}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{\alpha L}{\sqrt{2}\sigma_x(\tau_{\text{off}})}\right)\right], \tag{5.114}$$

式中，erf 为误差函数.

当棘轮势恢复后，粒子在时间间隔 τ_{on} 内，在势场力作用下回到距其最近的势阱底部. 如果温度远小于势垒高度，那么势存在时，粒子的运动主要受势的影响. 按照广义爱因斯坦关系，我们写出粒子的平均位移

$$\langle x(t)\rangle = \frac{F\langle x^2(t)\rangle_{\text{free}}}{2k_{\mathrm{B}}T} = \frac{F}{m}t^2 E_{2-\mu,3}(-\gamma_\mu t^{2-\mu}), \quad 0 \leqslant t \leqslant \tau_{\text{on}}, \tag{5.115}$$

其中，F 为双线性势组成的棘轮势的左右两边的斜率.

粒子在一个棘轮势的空间周期内的平均位移近似为

$$\langle x(t)\rangle_{\mathrm{R}} \simeq (1-\alpha)L + \frac{U_0}{\alpha L m\gamma_\mu}\frac{t^\mu}{\Gamma(1+\mu)}, \quad (1-\alpha)L \leqslant x \leqslant L \tag{5.116}$$

和

$$\langle x(t)\rangle_{\mathrm{L}} \simeq -\alpha L - \frac{U_0}{(1-\alpha)L m\gamma_\mu}\frac{t^\mu}{\Gamma(1+\mu)}, \quad -L \leqslant x \leqslant -\alpha L. \tag{5.117}$$

假设温度远小于位垒高度，则粒子到达势底部后，很难再爬坡而停止迁移和扩散，从而在势底部位置处形成了一些新的 δ 分布. 当势撤离时，这些 δ 分布再开始新一轮自由扩散，如此反复循环.

势存在时，一个在势垒顶部的粒子沿着较长边下滑到势底部，所需的条件和时间是

$$(1-\alpha)L + \frac{U_0}{\alpha L m\gamma_\mu}\Gamma^{-1}(1+\mu)\tau_{\text{on}}^\mu \geqslant L \tag{5.118}$$

和

$$\tau_{\text{on}} \geqslant \left[\frac{(\alpha L)^2}{U_0}\frac{m\gamma_\mu}{\sin(\mu\pi/2)}\Gamma(1+\mu)\right]^{1/\mu}. \tag{5.119}$$

在一个势脱离与恢复的循环内 ($\tau = \tau_{\text{on}} + \tau_{\text{off}}$)，其中势存在时间 τ_{on} 足够长，以致粒子更易滑落到势底部，然后势再脱离一段时间 τ_{off}，粒子平均扩散通过的棘轮势的周期个数为

$$R = \sum_{i=-\infty}^{\infty} iP_{iL}, \tag{5.120}$$

其中，P_{iL} 是粒子在第 i 个阱的概率，

$$P_{iL}=\int_{(i-\alpha)L}^{(i+1-\alpha)L}W(x,\tau_{\rm off}){\rm d}x. \tag{5.121}$$

由于棘轮势在一个周期内相对于势能极小具有左右不对称性，因此一个粒子从 $x=iL$(例如，$x=0$) 出发，扩散通过其两侧阱的数目是不同的. 通过的净阱数目除以循环周期，即为平均概率速流：

$$J=\frac{\displaystyle\sum_{i=-\infty}^{\infty}iP_{iL}}{\tau_{\rm on}+\tau_{\rm off}}, \tag{5.122}$$

其中，

$$P_{iL}=\frac{1}{2}\left\{{\rm erf}\left[\frac{(i-\alpha)L}{\sqrt{2}\sigma_x(\tau_{\rm off})}\right]-{\rm erf}\left[\frac{(i+1-\alpha)L}{\sqrt{2}\sigma_x(\tau_{\rm off})}\right]\right\}. \tag{5.123}$$

注意在以上的近似公式中，由方程 (5.119) 确定的 $\tau_{\rm on}$ 大于其真实值，那么概率速流 J 的理论估计可能小于动力学模拟数值，并且流的峰的位置作为 τ 的函数可能向大 τ 移动.

3. 结果和讨论

使用无量纲单位 $k_{\rm B}=1$、$m=1$ 和 $L=1$. 图 5.16 画出了净概率 P_f-P_b 随 $\tau_{\rm off}$ 的变化，其极大值出现在一个有限的 $\tau_{\rm off}^{\max}$，这个量的一个好的选择为

$$\tau_{\rm off}^{\max}=(\tau_b-\tau_f)\ln(\tau_b/\tau_f), \tag{5.124}$$

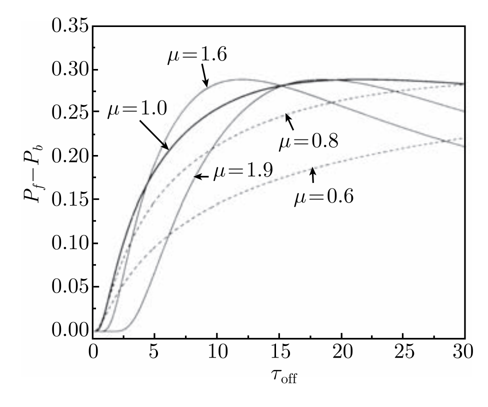


图 5.16　净概率 P_f-P_b 随 $\tau_{\rm off}$ 的变化

其中，两个特征时间等于

$$\tau_b = \left[\frac{(\alpha L)^2 m\gamma_\mu \Gamma(1+\mu)}{2k_{\rm B}T}\right]^{1/\mu}, \tag{5.125}$$

$$\tau_f = \left\{\frac{[(1-\alpha)L]^2 m\gamma_\mu \Gamma(1+\mu)}{2k_{\rm B}T}\right\}^{1/\mu}. \tag{5.126}$$

结果发现：$\tau_{\rm off}^{\rm max}$ 的极小出现在 $1<\mu<2$ 区间，其依赖于温度和摩擦强度. 也就是说，朝右与朝左的概率差在超扩散区成为最大，这是因为粒子的方均根位移、P_f 和 P_b 均随着 μ 值的增加而增加. 不过，当 P_f 和 P_b 都很大时，P_f-P_b 的值并不达到极大；当然，若 P_f 和 P_b 都很小时，两者的差也不会大. 在一个固定的循环时间周期内，粒子概率速流作为 μ 的函数被画于图 5.17 中. 非常令人感兴趣的是，概率速流的极大出现在超扩散区，这是由于势脱离时粒子的自由扩散和势存在时粒子的下滑运动的协作效应造成的.

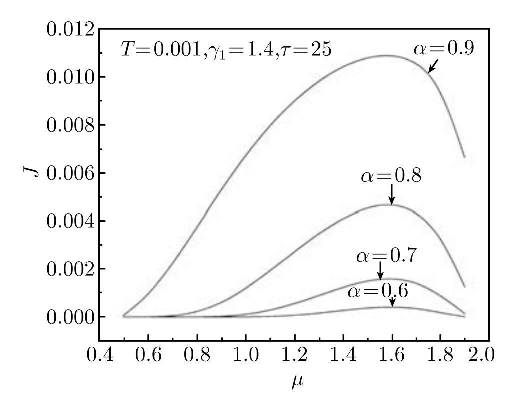


图 5.17 粒子概率速流作为 μ 的函数

小结

一个粒子在闪烁棘轮中存在定向概率速流的机制是：当势消失时，粒子向两个方向自由扩散，其更容易到达距其势底部较近的相邻周期内；当势恢复时，粒子被束缚在其所处的一个棘轮势的底部. 这样反复循环，由于棘轮势的不对称性，扩散粒子出现在距势底部较近的位垒一侧周期内的概率大于出现另一相邻周期内，那么粒子就朝着陡坡方向作定向运动.

为什么粒子概率速流的极大值出现在超扩散区呢？归结为两个原因：① 本模型要求势存在时间 $\tau_{\rm on}$ 足够长，粒子才能够下滑到势底部，按照粒子在常量力下的位移与自由状态下的方均位移之间的爱因斯坦关系知：粒子漂移相同距离时，超扩散所需的这个参数值较小；② 当势撤离时，在 $\tau_{\rm off}$ 时间间隔内，粒子从某个势底部位置向左右两个方向扩散，若两个最近势垒外侧波包尾巴的差越大，则粒子的净

位移就越远. 太慢或太快的扩散 (前者相当于粒子冻结，后者使棘轮势失去不对称选择作用) 都不利于势恢复后将一个波包切割的左右个数之差较大的需求，故概率速流的极大出现在超扩散情况.

习　　题

5-1　一个自由粒子受任意一个噪声 $\xi(t)$ 驱动，其运动方程为

$$\dot{x} = p, \quad \dot{p} = \xi(t),$$

试写出用 ξ 表示的变量 x 的特征函数；并证明只要 $\xi(t)$ 有一个有限的自关联时间，则 $\langle x^2(t)\rangle \sim t^3$.

5-2　求证力自由粒子速度的谱密度与噪声的密度有如下关系:

$$C_{vv}(\omega) = |\mu(\omega)|^2 C_{\xi\xi}(\omega),$$

其中，$\mu(\omega) = [m\gamma(\omega) - \mathrm{i}\omega]^{-1}$ 是频率有关的迁移率，$\gamma(\omega)$ 为阻尼函数的傅里叶变换.

5-3　试用第 4 章的 Lee 判据，证明 $0 < \delta < 2$ 非欧姆摩擦情况下，自由粒子的速度为一个各态历经变量，但在 $\delta = 2$ 极限下，却是非各态历经的.

5-4　系统加热库非线性耦合模型，也称独立振子模型，总的哈密顿量写作

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(q) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{m_j} + m_j\omega_j^2\left(x_j - \frac{c_j}{m_j\omega_j}F(q)\right)^2\right].$$

消去环境自由度 x_j 和 p_j，可得到关于系统变量的广义朗之万方程:

$$M\ddot{q}(t) + MF'(q(t))\int_0^t \mathrm{d}t'\gamma(t-t')F'(q(t'))\dot{q}(t') + V'(q) = F'(q(t))\xi(t),$$

并证明广义涨落耗散定理成立，即

$$\langle\xi(t)\xi(t')\rangle = Mk_{\mathrm{B}}T\gamma(t-t').$$

5-5　系统与热库自由度之间的耦合方式，即 $\{x, \dot{x}\}$ 和 $\{q_j, \dot{q}_j\}$ 两两相乘，共有四种组合. 如果总的拉格朗日量写作:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x) + \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{1}{2}m_j\dot{q}_j^2 - \frac{1}{2}m_j\omega_j^2 q_j^2\right) + \sum_{j=1}^{N}(c_j^{(1)}xq_j + c_j^{(2)}x\dot{q}_j + c_j^{(3)}\dot{x}q_j + c_j^{(4)}\dot{x}\dot{q}_j).$$

那么关于系统变量满足的广义朗之万方程中，会出现由于坐标与坐标，速度与速度耦合分别导致的势和质量重整化:

$$V_{\text{eff}}(x) = V(x) - \sum_{j=1}^{N} \frac{c_j^{(1)^2}}{2m_j\omega_j} x^2; \quad m_{\text{eff}} = m + \sum_{j=1}^{N} \frac{c_j^{(4)^2}}{m_j}.$$

若希望耦合仅引起阻尼和噪声，试重写上述拉格朗日量.

5-6　试证明长时间极限下，传输系数等于

$$\kappa(t \to \infty) = \frac{1}{2\pi\omega_b}[\sqrt{\omega_b^2 + 4\gamma_1^2} - 2\gamma_1].$$

第 6 章　连续时间无规行走

本章导读：回顾爱因斯坦研究分子热运动所建立的无规行走理论，每一步跳跃距离是固定的且在格点不停留；将之推广到考虑空间跳跃分布和两次跳跃之间的等待时间分布，即连续时间无规行走模型. 基于此导出分数阶扩散方程和自由粒子的方均位移 $\langle x^2(t)\rangle \propto t^\alpha$. 结果显示：若等待时间一次矩发散而跳跃二次矩有限，则出现欠扩散 $0<\alpha<1$；反之，产生超扩散 $1<\alpha<2$；若两者皆有限，则再现正常扩散. 重点分析莱维飞行作为一种长拖尾分布所诱发的粒子扩散行为.

爱因斯坦于 1905 年在关于流体中分子热运动的一篇论文中，用随机行走方法对处于平衡态的布朗粒子的方均位移进行了理论计算；同年，Pearson 在 *Nature* 杂志上提出了随机行走的概念. Einstein-Pearson 理论要求粒子的运动空间具有均匀和各向同性. 1965 年，Montroll 和 Weiss 建立了连续时间无规行走理论 (CTRW)，将随机过程分成两个部分：空间跳跃和两次跳跃之间的等待时间，两者由各自的分布密度函数决定. 例如，有缺陷的非晶格半导体中的带电粒子的扩散行为可以用一个长尾等待时间分布的 CTRW 模型来描述. 一些作者结合分数阶福克乐–普朗克方程，扩展了 CTRW 模型，使其可以运用于有势条件下粒子在周期性晶格中的扩散问题. 然而遗憾的是，这样的模型只能研究欠扩散. 本章对 CTRW 模型中的跳跃步长和等待时间分布函数的可产生性进行探讨，并改进 Metropolis 抽样技术，将其应用于计算不对称周期势中布朗马达定向运动的速度流.

6.1　醉汉格子行走

“醉汉”行走的方向是随机的，而每一步跳跃的距离是固定的，等于一个格子长度. 爱因斯坦就是用这个简单的模型研究气体分子运动，从而导出了自由粒子的方均位移随时间线性增长的著名公式.

一个典型的醉汉行走的方案可以在一个一维晶格上实现：在离散的时间步长 Δt 期间内，试验粒子跳到它最临界附近态中的一个，这里晶格常数为 Δx，粒子跳跃的方向是随机的. 这个过程被主方程所描写：

$$W_j(t+\Delta t)=\frac{1}{2}W_{j-1}(t)+\frac{1}{2}W_{j+1}(t). \tag{6.1}$$

当然，这个过程在空间和时间均是局域化的. 方程 (6.1) 确定了粒子在时刻 $t+\Delta t$，在位置 j 的分布密度函数，对两个临近态 $j\pm 1$ 粒子分布的依赖性，前置因子 1/2 意味着跳跃方向的各向同性. 在连续极限 $\Delta t\to 0$ 和 $\Delta x\to 0$ 下，将概率密度 W 关于 Δt 和 Δx 进行泰勒展开，

$$W_j(t+\Delta t)=W_j(t)+\Delta t\frac{\partial W}{\partial t}+O[(\Delta t)^2], \tag{6.2}$$

$$W_{j\pm 1}(t)=W(x,t)\pm\Delta x\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}+O[(\Delta x)^3], \tag{6.3}$$

将以上两式代入方程 (6.1)，导致扩散方程

$$\frac{\partial W}{\partial t}=K_1\frac{\partial^2}{\partial x^2}W(x,t). \tag{6.4}$$

连续极限要求比值

$$K_1\equiv\lim_{\substack{\Delta x\to 0\\ \Delta t\to 0}}\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \tag{6.5}$$

有限，K_1 称为扩散常数，具有量纲 $[K_1]=\mathrm{cm}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$.

扩散方程 (6.4) 是统计动力学中最基本的方程之一，也是中心极限定理的直接结果. 分布密度函数的前两次矩，分别描写一个跳跃事件的平均距离 $\bar{X}=N^{-1}\sum_i X_i$ 和方均位移 $\overline{X^2}=N^{-1}\sum_i X_i^2$，任何两次跳跃所需时间为 Δt. 在这三个量存在的条件下，中心极限定理保证无规行走过程以平均速度 $V=\bar{X}/\Delta t$ 和扩散系数 $K=(2\Delta t)^{-1}(\overline{X^2}-\bar{X}^2)$ 来完全刻画. 此外，长时间后，即足够大的跳跃步数，在时刻 t，一定位置 x 的分布密度函数由扩散方程 (6.4) 的解产生，它是一个高斯函数：

$$W(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi K_1 t}}\exp\left(-\frac{x^2}{4K_1 t}\right). \tag{6.6}$$

以上的 $W(x,t)$ 也被称作传播子，即扩散方程 (6.4) 在尖锐初始条件 $W_0(x)=W(x,t=0)=\delta(x)$ 下的解. 方程 (6.4) 的单独模在时间上以指数衰减，

$$W(k,t)=\exp(-K_1k^2t), \tag{6.7}$$

扩散方程的空间傅里叶变换为

$$\frac{\partial W}{\partial t}=-K_1k^2W(k,t), \tag{6.8}$$

对于一个固定的波数 k，这是一个弛豫方程.

6.2 经典无规行走

对一些问题，譬如粒子通过强非均匀、部分破缺或湍流媒介的运动，朗之万或混合动力学方法就不再适用，那么，一个更加基本的模型需要建立. 用“半确定”定律 (即牛顿方程加上无规力) 对运动的描述要被抛弃；更恰当的是，演化被概率意义所支配的位移所描述. 这种方法已被应用于大量的问题之中，并且最近有非常大的发展.

现在从考虑一个粒子在 d 维空间无规行走这个古老的问题出发. 在最初的经典模型中，无规行走是一个断续过程：那里存在一个时间子 τ. 设想一个具有周期 τ 的节拍振子，在节拍的每次敲打 (即在每时刻 $t=\nu\tau$) 时，粒子完成一次跳跃，由任意长度和方向的矢量 $\boldsymbol{r}$ 来刻画. 假设每次跳跃在统计意义上是互相独立的. 由矢量 $\boldsymbol{r}$ 所描写的跳跃的转移概率或概率密度函数 (PDF)，用 $f(\boldsymbol{r})$ 表示.

令 $n_\nu(\boldsymbol{x})$ 为 ν 步以后在 $\boldsymbol{x}$ 处发现粒子的 PDF，已知粒子在时刻 $t=0$ 从 $\boldsymbol{x}=0$ 出发，则 $n_0(\boldsymbol{x})=\delta(\boldsymbol{x})$. 由于跳跃的相互独立性，那么关于 $n_\nu(\boldsymbol{x})$ 的方程是容易建立的. 其实，发现粒子在 $\nu+1$ 步位于 $\boldsymbol{x}$ 处的 PDF，等于它在时刻 t 位于 $\boldsymbol{x}'$ 的概率乘以一次跃迁的概率 $f(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$，对所有中间的位置 $\boldsymbol{x}'$ 求和，有

$$n_{\nu+1}(\boldsymbol{x})=\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{x}' f(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')n_\nu(\boldsymbol{x}'). \tag{6.9}$$

这个递推关系是容易求解的. 鉴于它的卷积形式，自然用傅里叶变换来处理. 一个 PDF 的傅里叶变换 $\tilde{n}(\boldsymbol{k})$ 称为特性函数，而跃迁概率的特性函数 $\tilde{f}(\boldsymbol{k})$ 称为无规行走的结构函数. 这些量定义为

$$\{\tilde{n}_\nu(k),\tilde{f}(k)\}=\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{x}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\{n_\nu(\boldsymbol{x}),f(\boldsymbol{x})\}. \tag{6.10}$$

在继续推演之前，我们导出一些简单的，但很重要的特性函数的行为. 令 $n(\boldsymbol{x})$ 为一任意可归一化的 PDF，它的特性函数为 $\tilde{n}(\boldsymbol{k})$，方程 (6.10) 能表示成一个平均：

$$\tilde{n}(\boldsymbol{k})=\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\rangle. \tag{6.11}$$

从这里我们获得以下关系：PDF 的矩可由特性函数的导数在 $\boldsymbol{k}=0$ 的值求出；归一化条件定出了特性函数在原点的值，

$$1=\tilde{n}(\boldsymbol{k}=0). \tag{6.12}$$

平均位置由下式获得：

$$\langle\boldsymbol{x}\rangle=-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}\,\tilde{n}(\boldsymbol{k})\big|_{\boldsymbol{k}=0}\,, \tag{6.13}$$

更一般地，对于任意的矩，即 $\boldsymbol{x}$ 的 p 分量乘积的平均，有

$$\langle x_{\alpha_1} x_{\alpha_2} \cdots x_{\alpha_p} \rangle = \mathrm{i}^{-p} \frac{\partial^p}{\partial k_{\alpha_1} \partial k_{\alpha_2} \cdots \partial k_{\alpha_p}} \tilde{n}(\boldsymbol{k})|_{\boldsymbol{k}=0} . \tag{6.14}$$

特别重要的是平均平方位移 (MSD)，即距离平方的平均 (在 d 维空间)，$r^2 = \sum_{i=1}^{d} x_i^2$：

$$\langle r^2 \rangle = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \tilde{n}(\boldsymbol{k})|_{\boldsymbol{k}=0} . \tag{6.15}$$

现在回到方程 (6.9)，对其实施傅里叶变换，有

$$\tilde{n}_{\nu+1}(\boldsymbol{k}) = \tilde{f}(\boldsymbol{k}) \tilde{n}_\nu(\boldsymbol{k}), \tag{6.16}$$

初始条件为 $\tilde{n}_0(\boldsymbol{k}) = 1$. 可以发现：$\tilde{n}_1(\boldsymbol{k}) = \tilde{f}(\boldsymbol{k})$，$\tilde{n}_2(\boldsymbol{k}) = \tilde{f}^2(\boldsymbol{k})$，而且有

$$\tilde{n}_\nu(\boldsymbol{k}) = \left[\tilde{f}(\boldsymbol{k})\right]^\nu , \tag{6.17}$$

故最终得到

$$n_\nu(\boldsymbol{x}) = (2\pi)^{-d} \int \mathrm{d}^d \boldsymbol{k} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \left[\tilde{f}(\boldsymbol{k})\right]^\nu . \tag{6.18}$$

这是经典无规行走问题的完全解. 清楚地显示分布密度函数的形态由特性函数彻底地确定.

为简单起见，我们首先考虑对称无规行走，由 $\boldsymbol{x}$ 的偶函数来表征：$n(\boldsymbol{x}) = n(|\boldsymbol{x}|)$ 和 $\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = \tilde{f}(|\boldsymbol{k}|)$. 当结构函数对应于一个著名稳定分布，则可获得一类重要的解. 那些分布由下列的不变性所定出：

$$\tilde{f}(\alpha_1 \boldsymbol{k}) \tilde{f}(\alpha_2 \boldsymbol{k}) = \tilde{f}(\alpha \boldsymbol{k}), \tag{6.19}$$

其中，α_1 和 α_2 为给定的正常数，α 是两者的函数. 这个泛函方程的解是莱维分布：

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = \exp\left(-C|\boldsymbol{k}|^\beta\right), \quad 0 < \beta \leqslant 2, \tag{6.20}$$

β 取值有一个上限，这是因为若 $\beta > 2$，则跃迁分布密度函数 $f(\boldsymbol{x})$ 不再正定. 方程 (6.19) 被推广为

$$\prod_{m=1}^{j} \tilde{f}(\alpha_m \boldsymbol{k}) = \tilde{f}(\alpha \boldsymbol{k}). \tag{6.21}$$

对莱维分布而言，有合成法则：

$$\alpha = \left(\sum_{m=1}^{j} \alpha_m^\beta\right)^{1/\beta} , \tag{6.22}$$

特别地，我们发现

$$[\tilde{f}(\boldsymbol{k})]^{\nu} = \tilde{f}(\nu^{1/\beta}\boldsymbol{k}). \tag{6.23}$$

现在考虑由结构函数 (6.20) 式所特征的无规行走. 结合方程 (6.17) 和 (6.23)，我们发现 ν 步以后在 $\boldsymbol{x}$ 找到粒子的 PDF 的傅里叶变换为

$$\tilde{n}_{\nu}(\boldsymbol{k}) = \exp(-\nu C k^{\beta}). \tag{6.24}$$

从而分布密度函数在所有时刻均保持莱维分布形式；特性函数的焦点是简单地乘以 ν，即它正比于时间. 故无规行走有一个重要的自相似性质.

$\beta = 2$ 的莱维分布为一简单的高斯函数. 此情况下 (6.24) 式的逆傅里叶变换能解析地获得，其是高斯的，即

$$n_{\nu}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(4\pi\nu C)^{d/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4\nu C}\right), \quad \beta = 2. \tag{6.25}$$

对应的方均位移容易由方程 (6.15) 给出：

$$\langle r^2 \rangle = 2dC\nu, \quad \beta = 2. \tag{6.26}$$

MSD 的增长正比于时间. 我们从而得出重要的结论：一个由高斯结构函数定义的无规行走具有正常扩散行为.

现考虑结构函数中的 β 取值为 $0 < \beta < 2$ 的情况. 此时分布密度函数，即方程 (6.24) 的逆变换，一般无简单的解析形式，不过应排除 $\beta = 1$ 的情况，这对应于洛伦兹或柯西分布. 莱维分布的主要性质是存在一个长尾巴，并且对所有 $0 < \beta < 2$ 的值，MSD 是无限的. 其实，将方程 (6.24) 代入方程 (6.15)，我们发现：$\langle r^2 \rangle \sim k^{\beta-2}|_{k=0} = \infty$. 出于这个原因，稳态莱维分布很久以来被说是“数学上的妖怪”，而无物理实用性. 最近，物理学家对之产生了兴趣，因此莱维统计才被重新关注.

下面研究不对称 PDF 的一般情形，即一次矩不为零，人们可能会问这样的问题：为什么稳定分布在无规行走理论，或更广义地说在物理中，发挥一个特殊的作用？考虑一个由任意结构函数确定的无规行走，这里人们仅需要它在 $\boldsymbol{k} = 0$ 附近是一个解析函数，即

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}^d \boldsymbol{x} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \rangle, \tag{6.27}$$

其中，$f(\boldsymbol{x})$ 不是特定的. 将上式指数展开，我们有

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = 1 + \mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \langle \boldsymbol{x} \rangle - \frac{1}{2}\boldsymbol{k}\boldsymbol{k} : \langle \boldsymbol{x}\boldsymbol{x} \rangle + O(k^3). \tag{6.28}$$

为简单起见，这里考虑各向同性跃迁情况，则

$$\langle x_i x_j \rangle = \delta_{ij}\frac{1}{d}\langle x_i x_i \rangle = \delta_{ij}\frac{1}{d}\langle r^2 \rangle, \tag{6.29}$$

方程 (6.28) 退化为

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = 1 + \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle \boldsymbol{x}\rangle - \frac{1}{2d}k^2\langle r^2\rangle + O(k^3). \tag{6.30}$$

假设 $\tilde{f}(\boldsymbol{k})$ 具有解析性，意味着这个级数的系数，即 $f(\boldsymbol{x})$ 的矩是有限的；另外，基于累积定理，对于小 k，一个任意结构函数能被表示成

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = \exp\left[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle \boldsymbol{x}\rangle - \frac{1}{2d}k^2\langle\langle r^2\rangle\rangle + \cdots\right], \tag{6.31}$$

二次矩定义为

$$\langle\langle r^2\rangle\rangle = \langle r^2\rangle - |\langle \boldsymbol{x}\rangle|^2 = \langle|\boldsymbol{x} - \langle \boldsymbol{x}\rangle|^2\rangle. \tag{6.32}$$

所以在小 $\boldsymbol{k}$ 极限，任何解析结构函数趋于方程 (6.31) 的形式.

引入真实的时间变量，$t = \nu\tau$，计算密度轮廓，更名为 $n(\boldsymbol{x};t) = n_\nu(\boldsymbol{x})$. 利用方程 (6.18) 和 (6.31)，我们发现

$$n(\boldsymbol{x};t) = (2\pi)^{-2d}\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\exp\left(\mathrm{i}\nu\tau\boldsymbol{k}\cdot\frac{\langle \boldsymbol{x}\rangle}{\tau} - \frac{1}{2d}k^2\nu\tau\frac{\langle\langle r^2\rangle\rangle}{\tau} + \cdots\right). \tag{6.33}$$

定义[①]

$$\boldsymbol{V} = \frac{\langle \boldsymbol{x}\rangle}{\tau}, \quad D = \frac{\langle\langle r^2\rangle\rangle}{2d\tau}. \tag{6.34}$$

后一个式子正是著名的爱因斯坦关系. 我们现在有

$$n(\boldsymbol{x};t) = (2\pi)^{-2d}\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{V}t)}\mathrm{e}^{-k^2Dt}, \tag{6.35}$$

这得出

$$n(\boldsymbol{x};t) = \frac{1}{(2\pi Dt)^{d/2}}\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{V}t|^2}{4Dt}\right). \tag{6.36}$$

这个函数被称为高斯波包，它描绘了一个密度轮廓. 在零时刻，粒子聚集在原点；$t > 0$，轮廓线伸展 (扩散)，并且它的极大 (波峰) 以一个常速度 $\boldsymbol{V}$ 移动 (平流). 在不同的时刻，轮廓线的形态被 Péclet 数 (Pe) 确定，这个数度量了平移与扩散比较的相对重要性，

$$Pe = \frac{VL}{D}, \tag{6.37}$$

其中，L 是一个特征长度.

① 注意：这里的 $\langle \boldsymbol{x}\rangle$ 和 $\langle\langle r^2\rangle\rangle$ 是跃迁 PDF$f(\boldsymbol{x})$ 而不是 $n(\boldsymbol{x};t)$ 的一次和二次矩.

方程 (6.36) 是在 $k \to 0$ 极限下推导的，其对应于 $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{V}t| \to \infty$；因此，对每个固定 $\boldsymbol{x}$，该方程代表了一个长时间渐进极限.

以上是关于概率论中的著名**中心极限定理**的简单推导. 在目前的背景下，可作如下的简洁陈述：任何无规行走的概率密度函数具有一个渐进趋于高斯波包的解析结构函数. 这就是为什么高斯分布具有特殊重要性的缘故. 应该注意的是高斯波包是平移–扩散方程的格林函数：

$$\frac{\partial n(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\boldsymbol{x},t) - \boldsymbol{V} \cdot \nabla n(\boldsymbol{x},t), \tag{6.38}$$

即为对应于初始条件 $n(\boldsymbol{x},0) = \delta(\boldsymbol{x})$ 的解. 若 $\boldsymbol{V} = 0$(分布密度函数对称)，则这个方程退化为通常的扩散方程.

我们现在作无规行走与基于朗之万方程或混合动力方程的扩散理论的完全连接：任何无规行走均渐进表现为一个扩散过程. 用分布密度函数的宽度所测量的位移平方平均是

$$\langle |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{V}t|^2 \rangle = 2dDt. \tag{6.39}$$

这里 D 是扩散系数，由方程 (6.34) 的第二式定出①.

中心极限定理的主要假设是结构函数的解析性. 如果这个条件被破坏，会发生什么呢？代表性的例子是：一个非解析函数对于小 $\boldsymbol{k}$ 可能有一个包含非整数幂的展开，也就是

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = 1 - Ck^{\beta} + \cdots, \quad 0 < \beta < 2. \tag{6.40}$$

这种情况清楚地与稳定莱维 PDF 相关. 它将渐进导致一个确定的非高斯轮廓线，方均位移发散. 这种分布密度函数不满足扩散方程，而是属于超扩散范畴. 这种扩散的理论将在推广的无规行走理论框架下讨论.

6.3　时空非马尔可夫性

6.3.1　广义主方程

连续时间无规行走模型的核心含义是：总的时间 t 等于 N 次态等待时间之和，即 $t = \sum_{n=1}^{N} \tau_n$. 本节考虑长尾等待时间的连续时间无规行走 (SLT-CTRW)，不用分数阶导数的概念，而是建立广义主方程.

① 在方程 (6.34) 和 (6.39) 中存在因子 $2d$，因为考虑的是 d 维空间矢量 $(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{V}t)$ 的平方，这对均匀问题是合适的. 如果是单一方向，则 $d = 1$.

1. 跳跃长度和等待时间分布

通过一个发生在规则时刻 $t = j\tau$ 的无规行走来实现扩散过程并不是很真实的. 现在引入一个非常有用的无规行走概念的推广，其中时间作为一个连续变量出现. CTRW 模型的基本思想是：一个给定跳跃的长度以及两次成功跳跃之间的等待时间，从一个分布密度函数 $\psi(x,t)$ 中抽取. 基于 $\psi(x,t)$，跳跃长度分布密度函数为

$$\lambda(x) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t\psi(x,t); \tag{6.41}$$

等待时间分布密度函数是

$$w(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\psi(x,t). \tag{6.42}$$

那么，$\lambda(x)\mathrm{d}x$ 就是一个跳跃长度位于 $(x, x+\mathrm{d}x)$ 的概率，$w(t)\mathrm{d}t$ 则为一个等待时间处于间隔 $(t, t+\mathrm{d}t)$ 的概率. 如果跳跃长度和等待时间是两个独立随机变量，那么人们发现关于跳跃分布密度函数的脱耦形式：$\psi(x,t) = w(t)\lambda(x)$. 若两者是耦合的，则 $\psi(x,t) = p(x|t)w(t)$ 或者 $\psi(x,t) = p(t|x)\lambda(x)$. 含义为：一定长度的跳跃需付出一定时间的代价，反之亦然；等待一段时间后带来一个一定长度的跳跃. 连续时间无规行走模型的示意图被显示在图 6.1，图中在某一节点上圆圈半径大的表示粒子在该态停留的时间较长.

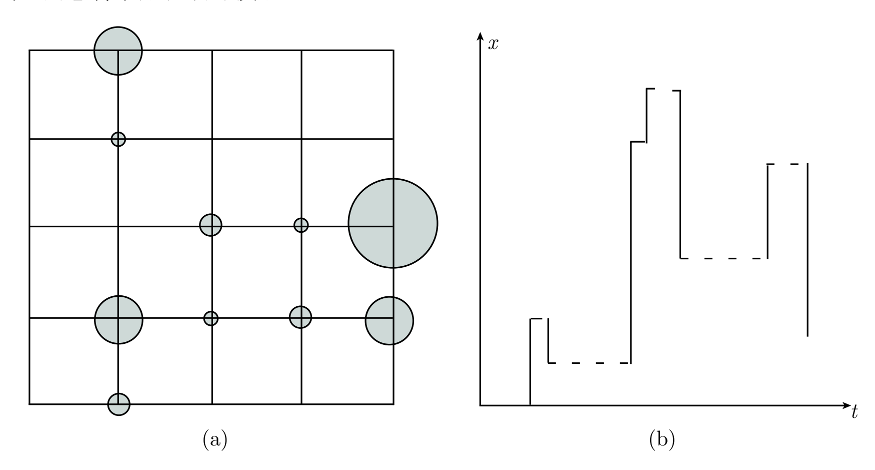


图 6.1 连续时间无规行走示意图

连续时间无规行走能从平均等待时间

$$T = \int_0^{\infty} \mathrm{d}tw(t)t \tag{6.43}$$

和跳跃长度平方平均

$$\varSigma^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\lambda(x)x^2, \tag{6.44}$$

的有限或发散来进行分类. 也就是平均等待时间发散而跳跃长度方均有限为欠扩散；平均等待时间有限而跳跃长度方均发散为超扩散；两者均有限为正常扩散.

事实上，最后一种情况可以回到布朗扩散情形，即自由粒子的方均位移随时间线性增长. 考虑脱耦的分布密度函数 $\psi(x,t)=w(t)\lambda(x)$，并设平均等待时间 T 和跳跃长度方均 Σ^2 两者均有限. 典型的实例是：等待时间分布密度函数为泊松分布 $w(t)=\tau^{-1}\exp(-t/\tau)$，$T=\tau$；跳跃长度 PDF 为高斯函数 $\lambda(x)=(4\pi\sigma^2)^{-1/2}\exp\left[-x^2/(4\sigma^2)\right]$，导致 $\Sigma^2=2\sigma^2$. 从而，前者的时间拉普拉斯和后者的空间傅里叶变换具有如下的形式：

$$\hat{w}(s)\sim 1-s\tau+O(\tau^2), \tag{6.45}$$

$$\tilde{\lambda}(k)\sim 1-\sigma^2k^2+O(k^4). \tag{6.46}$$

事实上，任何具有有限的 T 和 Σ^2 的分布密度函数，其最低阶与以上两式有相同的结果，则过程的长时间行为就相同.

基于上述定义，连续时间无规行走过程被一个广义方程来描写，其为

$$\eta(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'\int_0^{\infty}\mathrm{d}t'\eta(x',t')\psi(x-x',t-t')+\delta(x)\delta(t), \tag{6.47}$$

式中，分布密度函数 $\eta(x,t)$ 代表粒子在时刻 t 到达位置 x 的概率密度，其来自于 t' 时刻已经到达位置 x' 的所有粒子的概率密度 $\eta(x',t')$ 的贡献，方程右边第二项是初始条件.

t 时刻在位置 x 处发现粒子的概率密度为

$$W(x,t)=\int_0^t\mathrm{d}t'\eta(x,t')\varphi(t-t'), \tag{6.48}$$

上式右边的 φ 的意义是在时间间隔 $(0,t)$ 内未发生跳跃的概率，它等于

$$\varphi(t)=1-\int_0^t\mathrm{d}t'w(t'), \tag{6.49}$$

在傅里叶–拉普拉斯空间，分布密度函数满足一个代数方程：

$$W(k,u)=\frac{1-w(u)}{u}\frac{W_0(k)}{1-\psi(k,u)}. \tag{6.50}$$

这里，$W_0(k)$ 是初始条件 $W_0(x)$ 的傅里叶变换. 只要知道跳跃长度和等待时间联合分布, 就可以通过对方程 (6.50) 进行逆变换而得到扩散方程，见第 6.4 节.

2. 长等待对应于欠扩散

在连续时间无规行走模型中，一个粒子在 d 维空间作一次任意长度和方向的跳跃 $\boldsymbol{r}$，然后在它的新位置上保持一段有限的时间 t；之后再作一次新的跳跃，如

此等等．需要强调的是每次跳跃是相互无关的．跳跃矢量 $\boldsymbol{r}$ 的概率密度，即跃迁 PDF，以 $f(\boldsymbol{r})$ 表之，这与经典无规行走是一样的, 但是与经典形成对比的是，跳跃是在随机间隔内完成的，那么必须被统计定义．故引入等待时间分布 $\psi(t)$，定义为两次成功跳跃之间的暂停间隔 t 的分布密度．换句话说，$\psi(t)$ 表示了前一次跳跃以后所需时间 t 的分布密度函数．引入这个函数的拉普拉斯变换以及对应的逆变换公式：

$$\hat{\psi}(s)=\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{-st}\psi(t), \tag{6.51}$$

$$\psi(t)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\gamma}\mathrm{d}s\mathrm{e}^{st}\hat{\psi}(s), \tag{6.52}$$

其中，γ 代表逆拉普拉斯变换时，在复 s 平面上的通常的 Bromwich 周线，即平行于虚轴且位于积分所有极点的右边．

令 $\psi_j(t)$ 代表从时刻 $t=0$ 出发，在时刻 t 发生了第 j 次跳跃的分布密度函数，那么

$$\begin{aligned}\psi_j(t)&=\int_0^t\mathrm{d}\tau\psi(t-\tau)\psi_{j-1}(\tau),\quad j>1,\\ \psi_1(t)&=\psi(t).\end{aligned} \tag{6.53}$$

这些关系的意义从函数 $\psi_j(t)$ 和 $\psi(t)$ 的定义来看是显然的．在拉普拉斯表象中，卷积变换成为乘积，从而获得

$$\hat{\psi}_j(s)=\hat{\psi}(s)\hat{\psi}_{j-1}(s),\quad \hat{\psi}_1(s)=\hat{\psi}(s). \tag{6.54}$$

这个递推关系是容易求解的

$$\hat{\psi}_j(s)=|\hat{\psi}(s)|^j\equiv\hat{\psi}^j(s). \tag{6.55}$$

我们的目的是计算密度轮廓线 $n(\boldsymbol{x};t)$，其定义成一个粒子从时刻 $t=0$ 于位置 $\boldsymbol{x}=0$ 处出发，t 时刻在 $\boldsymbol{x}$ 处出现的分布密度函数．令 $q(\boldsymbol{x};t)$ 是粒子经过一次跳跃在时刻 t 直接到达 $\boldsymbol{x}$ 的分布密度函数，也令 $\psi(t)$ 为粒子在时间 t 期间一个跳跃之后保持不动的分布密度函数，于是有

$$n(\boldsymbol{x};t)=\int_0^t\mathrm{d}\tau\phi(t-\tau)q(\boldsymbol{x};\tau). \tag{6.56}$$

我们现在计算出现在以上方程右边的两个函数．首先注意在间隔 $(0,t)$ 内，最后一步被用去了一些时间的分布密度函数是

$$\int_0^t\mathrm{d}t'\psi(t'); \tag{6.57}$$

那么在 $(0,t)$ 期间一个跳跃以后，粒子保持固定的概率为

$$\phi(t)=1-\int_0^t \mathrm{d}t'\psi(t'), \tag{6.58}$$

它的拉普拉斯变换是

$$\hat{\phi}(s)=\frac{1}{s}-\frac{\hat{\psi}(s)}{s}. \tag{6.59}$$

为了计算 $q(\boldsymbol{x};t)$，必须考虑粒子经过一个跳跃之后能够到达 $\boldsymbol{x}$ 的所有独立方式：它也许经过一步、两步、等等，而到达 $\boldsymbol{x}$. 对于一个 j 步过程，$q_{(j)}(\boldsymbol{x};t)$ 由 j 步后到达 $\boldsymbol{x}$ 的 PDF $n_j(\boldsymbol{x})$，乘以在该时刻发生了 j 步跳跃的 PDF $\psi_j(t)$ [见方程 (6.53)~(6.55)]：

$$q(\boldsymbol{x};t)=\sum_{j=0}^{\infty}\psi_j(t)n_j(\boldsymbol{x}). \tag{6.60}$$

从前一节的观点容易发现，$n_j(\boldsymbol{x})$ 以相同方式与普通无规行走的跃迁分布密度函数 $f(\boldsymbol{x})$ 相联系，即方程 (6.17). 对于任何函数 $g(\boldsymbol{x};t)$，我们引入相对于 $\boldsymbol{x}$ 的傅里叶变换 (用上标“$\sim$”表示)，相对于 t 的拉普拉斯变换 (用上标“$\wedge$”表示)：

$$\hat{\tilde{g}}(\boldsymbol{k};s)=\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{-st}g(\boldsymbol{x};t). \tag{6.61}$$

对方程 (6.60) 实行这种变换，并利用方程 (6.17) 和 (6.55)，有

$$\hat{\tilde{q}}(\boldsymbol{k};s)=\sum_{j=0}^{\infty}\hat{\psi}_j(s)\tilde{n}_j(\boldsymbol{k})=\sum_{j=0}^{\infty}\hat{\psi}^j(s)\tilde{f}^j(\boldsymbol{k}); \tag{6.62}$$

这个几何级数求和后的结果为

$$\hat{\tilde{q}}(\boldsymbol{k};s)=\frac{1}{1-\hat{\psi}(s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})}. \tag{6.63}$$

现将这个结果引入到方程 (6.56)，该方程的傅里叶–拉普拉斯 (F-L) 变换形式如下：

$$\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)=\hat{\psi}(s)\hat{\tilde{q}}(\boldsymbol{k};s); \tag{6.64}$$

利用方程 (6.59) 和 (6.63)，我们获得

$$\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)=\frac{1-\hat{\psi}(s)}{s}\frac{1}{1-\hat{\psi}(s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})}. \tag{6.65}$$

再变换回到实空间和时间，我们发现密度分布函数的轮廓：

$$n(\boldsymbol{x};t)=(2\pi)^{-d}\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}(2\pi\mathrm{i})^{-1}\int_{\gamma}\mathrm{d}s\mathrm{e}^{st}\frac{1-\hat{\psi}(s)}{s}\frac{1}{1-\hat{\psi}(s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})}. \tag{6.66}$$

方程 (6.65) 和 (6.66) 被称为 Montroll-Weiss 方程，它产生了连续时间无规行走问题的完全解. 如果结构函数 $\tilde{f}(\boldsymbol{k})$ 和等待时间分布 $\hat{\psi}(s)$ 给定，那么密度轮廓就可以通过一个求积完全地确定. 不过，后者往往不能给出解析形式.

现在显示密度轮廓 $n(\boldsymbol{x};t)$ 满足一个非常有趣的积分方程. 我们回忆这个函数的初始条件：$n(\boldsymbol{x};0)=\delta(\boldsymbol{x})$，其傅里叶变换是：$\hat{n}(\boldsymbol{k};0)=1$. 所以，它的时间导数的 F-L 变换为：$s\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)-1$，故利用方程 (6.65)，我们写出

$$
\begin{aligned}
s\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)-1 &= \frac{1-\hat{\psi}(s)}{1-\hat{\psi}(s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})}-1 \\
&= -[1-\tilde{f}(\boldsymbol{k})]\frac{\hat{\psi}(s)}{1-\hat{\psi}(s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})} \\
&= -[1-\tilde{f}(\boldsymbol{k})]\frac{1-\hat{\psi}(s)}{s[1-\hat{\psi}(s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})]}\frac{s\hat{\psi}(s)}{[1-\hat{\psi}(s)]}.
\end{aligned} \tag{6.67}
$$

现定义函数

$$
\hat{\phi}(s)=\frac{s\hat{\psi}(s)}{1-\hat{\psi}(s)}, \tag{6.68}
$$

从而得到

$$
s\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)-1=-\hat{\phi}(s)[1-\tilde{f}(\boldsymbol{k})]\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s), \tag{6.69}
$$

对以上方程完成逆 F-L 变换，有

$$
\frac{\partial n(\boldsymbol{x};t)}{\partial t}=\int_0^t \mathrm{d}\tau\phi(t-\tau)\left[-n(\boldsymbol{x};t)+\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{x}' f(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')n(\boldsymbol{x}';t)\right]. \tag{6.70}
$$

这就是*广义主方程*，首先被 Montroll 和 Shlesinger 在 1984 年推导出，它支配着一个无规行走的密度轮廓的演化. 其特征行为是时间和空间的非马尔可夫性：$n(\boldsymbol{x};t)$ 的变化率由过去的历史和空间环境确定，这些行为的重要性由函数 $\psi(t)$ 和 $f(\boldsymbol{x})$ 的范围确定.

为了找出与经典无规行走的联系，我们考虑一个特殊情况. 令 $\tilde{f}(\boldsymbol{k})$ 是一个由方程 (6.30) 给出的各向同性的结构函数，为了方便，重新写出

$$
\tilde{f}(\boldsymbol{k})=1+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle\boldsymbol{x}\rangle-(2d)^{-1}k^2\langle x^2\rangle. \tag{6.71}
$$

令 $\hat{\psi}(s)$ 的形式为

$$
\hat{\psi}(s)=1-\langle t\rangle s+O(s^2), \quad s\to 0. \tag{6.72}
$$

其中，$\langle t\rangle$ 是等待时间分布的一次矩，即两次跳跃之间停顿的平均时间，假设为有

限. 我们将这些公式代入方程 (6.65), 在极限 $\boldsymbol{k}\to 0$ 和 $s\to 0$ 下求出后者, 有

$$\begin{aligned}\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s) &\approx \frac{1-(1-\langle t\rangle s)}{s\{1-[1-\langle t\rangle s][1+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle\boldsymbol{x}\rangle-(2d)^{-1}k^2\langle x^2\rangle]\}} \\ &= \frac{\langle t\rangle}{\langle t\rangle s-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle\boldsymbol{x}\rangle+(2d)^{-1}k^2\langle x^2\rangle+[\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle\boldsymbol{x}\rangle-(2d)^{-1}k^2\langle x^2\rangle]\langle t\rangle s}. \end{aligned} \tag{6.73}$$

忽略分母中的方括号项, 因为它们是高阶小项, 我们发现

$$\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)=\frac{1}{s-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{V}+Dk^2}, \tag{6.74}$$

这里,

$$\boldsymbol{V}=\frac{\langle\boldsymbol{x}\rangle}{\langle t\rangle},\quad D=\frac{\langle x^2\rangle}{2d\langle t\rangle}. \tag{6.75}$$

对方程 (6.74) 作逆拉普拉斯变换, 可从它右边在极点 $s=\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{V}-Dk^2$ 的留数获得

$$\tilde{n}(\boldsymbol{k};t)=\exp\left(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{V}t-Dk^2t\right). \tag{6.76}$$

这个函数的逆傅里叶变换精确地是高斯波包 [方程 (6.36)]. 这个结果也就证实了如下的连续时间无规行走的中心极限定理:

对于任何由至少具有有限的一次和二次矩的跃迁分布密度函数 $f(\boldsymbol{x})$ 和等待时间分布密度函数 $\psi(t)$, 所定义的连续时间无规行走, 密度轮廓 $n(\boldsymbol{x};t)$ 在长时间或大距离情况下, 趋于一个高斯波包.

虽然渐进高斯波包在物理上使用的频率是最高的, 但是非高斯过程最近几年引起了人们的很大兴趣, 这是因为它们不平常的行为以及与许多物理问题都有关. 只要中心极限定理的条件不被满足, 它们就能被实现, 即 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $\psi(t)$ 这两个分布之一或两者均有一个长尾巴. 这里我们简要地论及第一种情况, 接下来的节中研究第二种情况.

在第一种情况, 我们假设 $\hat{\psi}(s)$ 有正常形式 [方程 (6.72)], 而结构函数为如下非解析的形式:

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k})=1+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\langle\boldsymbol{x}\rangle-Bk^{\beta}+\cdots,\quad 0<\beta<2,\quad k\to 0, \tag{6.77}$$

注意这里 $k=\sqrt{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}}$. 在这种情况下, 我们发现密度轮廓的傅里叶–拉普拉斯变换的一个类似于方程 (6.74) 的公式:

$$\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s)=\frac{1}{s-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{V}+bk^{\beta}}, \tag{6.78}$$

其中, $b=B/\langle t\rangle$. 这个函数代表一个莱维波包, 即一个以速度 $\boldsymbol{V}$ 在空间传播的具有长尾巴的类莱维分布.

6.3.2 分布密度函数

1. 方均位移

我们现在确定一类有实际物理重要性的连续时间无规行走，它由一个原点附近对称和解析的结构函数定义：

$$\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = 1 - \frac{1}{2d}\sigma^2 k^2 + \cdots, \quad k \to 0; \tag{6.79}$$

另外，等待时间分布密度函数的拉普拉斯变换在 $s=0$ 附近为一个非解析函数：

$$\hat{\psi}(s) = 1 - \tau_D^\alpha s^\alpha + \cdots, \quad 0 < \alpha < 1, \quad s \to 0. \tag{6.80}$$

由方程 (6.79) 和 (6.80) 定义的连续时间无规行走被称作标准的长尾连续时间无规行走 (SLT-CTRW)，它由以下四个参数确定：

(1) 过程的维数：d；

(2) 指数 α；

(3) 特征长度 σ；

(4) 特征时间 $\tau_{_D}$①.

我们现在考虑 $\hat{\psi}(s)$ 的逆拉普拉斯变换. 常数 1 的逆拉普拉斯变换是狄拉克 δ 函数 $\delta(t)$. s^α 的变换需要运用著名的 Tauberian 定理，结果为

$$L_t^{-1}[s^\alpha] = \frac{1}{\Gamma(-\alpha)} t^{-1-\alpha}, \quad s > 0. \tag{6.81}$$

这里用到了一个函数 $g(s)$ 的逆拉普拉斯变换的缩写：

$$L_t^{-1}[g(s)] = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_\gamma \mathrm{e}^{st} g(s) \mathrm{d}s, \tag{6.82}$$

其中，$\Gamma(z)$ 是著名的欧拉–伽马函数. 利用等式 $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$，我们发现等待时间分布密度函数：

$$\psi(t) = \frac{1}{\tau_{_D}} \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \left(\frac{t}{\tau_{_D}}\right)^{-1-\alpha} + \cdots, \quad t \to \infty. \tag{6.83}$$

Montroll-Weiss 方程 (6.65) 产生以下关于密度轮廓的傅里叶变换的渐进公式：

$$\tilde{n}(\boldsymbol{k}; t) = \tau_{_D} L_t^{-1} \left\{ \frac{1}{(\tau_{_D} s)^{1-\alpha}[1 - \tilde{f}(\boldsymbol{k})] + (\tau_{_D} s)\tilde{f}(\boldsymbol{k})} \right\}. \tag{6.84}$$

① 注意 $\tau_{_D}$ 不应与平移停顿持续时间 $\langle t \rangle$ 混绕在一起，例如，对方程 (6.80) 而言，$\langle t \rangle = \infty$.

利用下列结果

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \tilde{f}(\boldsymbol{k}) = -2d\sigma^2,$$

$$L_t^{-1}(s^\nu) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} t^{\nu-1}, \quad \nu > 0, \tag{6.85}$$

从方程 (6.15) 出发，我们给出无规行走者的平均平方位移的表达式：

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{\Gamma(1+\alpha)} \sigma^2 \left(\frac{t}{\tau_D} \right)^\alpha, \quad 0 < \alpha < 1. \tag{6.86}$$

故 SLT-CTRW 描写了一种典型的欠扩散过程.

2. 分布密度函数

现在推导一个 SLT-CTRW 的密度轮廓 $n(\boldsymbol{x};t)$ 的渐进解析表达式. 从 Montroll-Weiss 方程 (6.65) 出发，并且利用 (6.79) 式和 (6.80) 式，在 $s \to 0$ 和 $\boldsymbol{k} \to 0$ 极限下，有

$$\hat{n}(r;s) = \tau_D^\alpha s^{\alpha-1} (2\pi)^{-d} \int \mathrm{d}^d \boldsymbol{k} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \frac{1}{(\tau_D s)^\alpha + (\sigma k)^2/(2d)}, \tag{6.87}$$

其中，$r = (\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x})^{1/2}$.

我们无法在这里给出所有仔细的代数，包括这个公式的傅里叶–拉普拉斯积分的逆. 首要的事实是这个计算给出的结果就是密度轮廓的一般形式

$$n(r;t) = \sigma^{-d} \left(\frac{\tau_D}{t} \right)^{\alpha d/2} F(q), \tag{6.88}$$

这里引入了一个无量纲变量 q：

$$q = \left(\frac{\tau_D}{t} \right)^{\alpha/2} \frac{r}{\sigma}, \tag{6.89}$$

而 $F(q)$ 是一个仅依赖于 q 的复杂函数.

方程 (6.88) 是一个典型的标度关系. 它告诉我们：实际上密度轮廓依赖于 r，但仅是通过结合定义在方程 (6.89) 的 q 中，而 q 被称为相似变量. 密度轮廓为以下三个因子的乘积：

(1) 因子 σ^{-d} 引入了自然长度标度，其保证了正确的量纲；

(2) 第二个无量纲因子是单独时间的显函数；

(3) 第三个无量纲因子是一个单独相似变量 q 的函数，它的具体形式依赖于扩散指数 α 和维数 d.

虽然函数 $F(q)$ 一般不能解析计算，然而它的渐进行为能被获得：

$$F(q) \sim \exp\left(-bq^\delta\right), \quad \delta = \frac{2}{2-\alpha}, \quad q \to \infty. \tag{6.90}$$

从而给出一个特性扩展的指数行为. 注意到在 $\alpha=1$ 的情况下，即在正常扩散，$\delta=2$, $F(q)$ 退化为高斯函数，那么方程 (6.88) 退化为高斯波包 (6.36) 式. 我们重新获得中心极限定理. 这个极限情况允许我们固定常数 $b=1/4$.

标度律 (6.88) 式的另一个感兴趣的结论是涉及密度轮廓的矩，由下式给出：

$$\langle r^{2p}(t)\rangle=\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{x} r^{2p}\frac{a}{\sigma^d}\left(\frac{\tau_D}{t}\right)^{\alpha d/2}F(q). \tag{6.91}$$

做积分变量的变换 $\boldsymbol{x}\to\sigma(t/\tau_D)^{\alpha/2}\boldsymbol{y}$ [注意 $\boldsymbol{y}\cdot\boldsymbol{y}=q^2$]，有

$$\langle r^{2p}(t)\rangle=\sigma^{d+2p}\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{(d+2p)\alpha/2}\sigma^{-d}\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{-\alpha d/2}a\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{y}y^{2p}F(y) \tag{6.92}$$

注意最后对 q 的积分是一个纯粹的常数. 最终的结果为

$$\langle r^{2p}(t)\rangle=\sigma^{2p}M_p\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{p\alpha}. \tag{6.93}$$

这是关于矩的一个标度律.

注意到标度指数 $p\alpha$ 与空间的维数是无关的，此外，函数 $F(q)$ 的形式并不影响这个指数的值；它仅仅定出常数 M_p 的值. 后者依赖于阶数 p、扩散指数 α 和维数 d. 两个确定 SLT-CTRW 的参数是：σ 和 τ_D，它们分别是作为长度和时间的自然单位. 对于 $p=1$，(6.93) 式当然退化到 (6.86) 式. 在这种特殊情况下，常数 M_p 与 d 无关. 目前的计算还不能定出系数 M_p 的值，其将在下节给出它的显式.

现在将以上结果特殊化到一维 SLT-CTRW($d=1$)，这在许多应用中是感兴趣的. 首先，密度轮廓的拉普拉斯变换具有以下形式：

$$\hat{n}(x;s)=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\tau_D}{\sigma}(\tau_D s)^{(\alpha-2)/2}\mathrm{e}^{-q},\quad d=1, \tag{6.94}$$

其中，

$$q=\sqrt{2}(\tau_D s)^{\alpha/2}\frac{x}{\sigma},\quad d=1. \tag{6.95}$$

逆拉普拉斯变换通过最速下降法能被渐进完成，并且形式为

$$n(x;t)=\frac{1}{\sigma}\frac{\delta}{2^{3-\alpha}\Gamma\left(\dfrac{4-\alpha}{2}\right)}\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{-\alpha/2}\exp\left[-\frac{q^{2/(2-\alpha)}}{4}\right],\quad q\gg 1,\quad d=1. \tag{6.96}$$

这个函数表现出一个长尾密度轮廓.

6.3.3 非马尔可夫扩散方程

对于一般连续时间行走模型，Montroll-Shesinger 方程 (6.70) 已在前节导出了. 这里的目的是对于标准长尾连续时间行走，推导该方程的特殊形式，并研究它的一些行为.

1. Montroll-Shesinger 方程

我们考虑由方程 (6.79) 和 (6.80) 定义的 SLT-CTRW. 它的渐进 F-L 密度轮廓，能在 $\tau_D s \ll 1$ 和 $\sigma k \ll 1$ 的极限下，从 Montroll-Shesinger 方程 (6.70) 给出：

$$\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s) = \tau_D \frac{(\tau_D s)^{\alpha-1}}{(\tau_D s)^{\alpha} + (\sigma k)^2/(2d)}. \tag{6.97}$$

容易检验这个函数满足由方程 (6.59) 定义的核 $\hat{\phi}(s)$ 的主方程 (6.65) 式，其退化为

$$\hat{\phi}(s) = \frac{1}{\tau_D} \frac{1-(\tau_D s)^{\alpha}}{(\tau_D s)^{\alpha-1}}, \tag{6.98}$$

当 $\tau_D s \ll 1$，它可以简化成仅含主要项，则

$$\hat{\phi}(s) = \frac{1}{\tau_D}(\tau_D s)^{1-\alpha}. \tag{6.99}$$

主方程的傅里叶–拉普拉斯变换成为

$$s\hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s) - 1 = -\hat{\phi}(s)\frac{1}{2d}(\sigma k)^2 \hat{\tilde{n}}(\boldsymbol{k};s). \tag{6.100}$$

考虑密度轮廓的初始值是 $n(\boldsymbol{x};t=0) = \delta(\boldsymbol{x})$，则这个方程的逆傅里叶变换是

$$s\hat{n}(\boldsymbol{x};s) - \delta(\boldsymbol{x}) = \frac{\sigma^2}{2d}\hat{\phi}(s)\nabla^2 \hat{n}(\boldsymbol{x};s). \tag{6.101}$$

这看起来非常像一个扩散方程的拉普拉斯变换；不过，在拉普拉斯空间，扩散系数与 s 有关，结果导致方程 (6.101) 的逆拉普拉斯变换是一个积分方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\boldsymbol{x};t) = \int_0^t \mathrm{d}\tau H(\tau)\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t-\tau), \tag{6.102}$$

其中，

$$H(t) = \frac{\sigma^2}{2d}\phi(t). \tag{6.103}$$

在这一点上，我们的主要结论是：一个标准的长尾巴连续时间无规行走的密度轮廓满足一个线性的非马尔可夫方程. 鉴于这个方程与扩散方程有类同之处，我们称之为*非马尔可夫扩散方程*. 注意相对于一般情况 (6.70) 式而言，这个方程对于空间变量是马尔可夫的，这是因为结构函数 $\tilde{f}(\boldsymbol{k})$ 的解析性：项 $-k^2$ 产生出物理空间的拉普拉斯算符. 另外，密度轮廓的随时变化率被它的过去历史所影响. 已知记忆核 $H(t)$ 的长尾巴，有效影响区域扩展远到了过去. 这种行为预示着密度轮廓的非高斯性和欠扩散规律.

为了计算核 $H(t)$，我们注意到 $\hat{\phi}(s)$ 能简单地与等待时间分布的拉普拉斯变换相联系，$\hat{\psi}(s)$ 由方程 (6.80) 确定：

$$\hat{\phi}(s) = \frac{1}{\tau_D}(\tau_D s)^{1-\alpha} = \frac{1}{\tau_D}\left[1 - \hat{\psi}_{1-\alpha}(s)\right], \tag{6.104}$$

其中，$\hat{\psi}_{1-\alpha}(s)$ 代表函数 $\hat{\psi}(s)$ 中的指标由 α 变为 $1-\alpha$. 我们求逆拉普拉斯变换：1 的变换为 $\delta(t)$，它能方便地写作 $\tau_D\delta(t/\tau_D)$；第二项的变换由 Tauberian 定理渐进地给出，我们注意到因为 $0<\alpha<1$，所以 $1-\alpha>0$，

$$H(t) = \frac{\sigma^2}{2d\tau_D}\left[\delta\left(\frac{t}{\tau_D}\right) - \frac{1-\alpha}{\Gamma(\alpha)}\left(\frac{\tau_D}{t}\right)^{2-\alpha}\right]. \tag{6.105}$$

当 $t>0$，$\delta(t)$ 为零，这将帮助我们推导演化方程的一个有用的形式. 将方程 (6.105) 代入方程 (6.102)，发现

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\boldsymbol{x};t) = D_0\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t) - H_0\int_0^t \mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_D}{\tau}\right)^{2-\alpha}\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t-\tau), \tag{6.106}$$

其中，

$$D_0 = \frac{\sigma^2}{2d\tau_D}, \quad H_0 = \frac{1-\alpha}{\Gamma(\alpha)}\frac{1}{\tau_D}D_0. \tag{6.107}$$

方程 (6.106) 将演化描写成一个扩散系数为 D_0 的正常扩散和一个由第二项表示的非马尔可夫过程的叠加. 若自关联函数按指数随时间衰减，则马尔可夫近似是完全适合的. 在方程 (6.106) 中的核的特征行为是它的长尾，描写了非常慢的衰减，作为一个幂律，应使得 $2-\alpha>0$. 一个非常有趣的行为出现在系数 H_0 的表达式中：这个系数当 $\alpha=1$ 时消失. 从而在扩散情况 $(\alpha=1)$ 下，方程 (6.106) 中的非马尔可夫项不出现，那么我们就回到一个纯粹的扩散方程.

然而，方程 (6.106) 并不是如此的. 实际上，核 $\tau^{-2+\alpha}$ 在 $\tau=0$ 极限下发散. 这并不奇怪，因为 (6.105) 式给出的 $H(t)$ 表达式是一个渐进公式，对长时间是适合的，而不能运用于 $t\to 0$. 为了解决这个困难，我们在方程 (6.106) 的积分中引入一个低时间截断 $\tau_{\min}$，其由下式确定，以致演化方程写成下面的最终形式：

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\boldsymbol{x};t) = D_0\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t) - H_0\int_{\tau_{\min}}^t \mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_D}{\tau}\right)^{2-\alpha}\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t-\tau), \tag{6.108}$$

为了确定截断的标准，考虑这个方程的二次矩，即平均平方位移 (MSD). 该矩已被独立地在 (6.93) 式定出，并且显示出标度渐进：$\langle r^2(t)\rangle \sim t^\alpha$，从而 $\partial_t\langle r^2(t)\rangle \sim t^{\alpha-1}$. 我们现用方程 (6.108) 计算它的变化率：

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle r^2(t)\rangle = \int \mathrm{d}^d\boldsymbol{x}r^2\left\{D_0\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t) - H_0\int_{\tau_{\min}}^t \mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_D}{\tau}\right)^{2-\alpha}\nabla^2 n(\boldsymbol{x};t-\tau)\right\}. \tag{6.109}$$

完成对 $\boldsymbol{x}$ 的一个分部积分，并注意到

$$\int \mathrm{d}^d \boldsymbol{x} r^2 \nabla^2 n(\boldsymbol{x};t) = 2d, \tag{6.110}$$

用 (6.107) 式，我们获得

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle r^2(t)\rangle &= 2dD_0\left\{1-\frac{1-\alpha}{\Gamma(\alpha)\tau_D}\int_{\tau_{\min}}^t \mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_D}{\tau}\right)^{2-\alpha}\right\}\\ &= 2dD_0\left\{1+\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\frac{t^{\alpha-1}-\tau_{\min}^{\alpha-1}}{\tau_D^{\alpha-1}}\right\}.\end{aligned} \tag{6.111}$$

这个公式包含了一个具有正确标度的项：$t^{\alpha-1}$ 和一个常量项，其对于 $\alpha < 1$ 和 $t \to \infty$ 时起支配作用. 故常量这一项是虚假的，但是，我们能切断 $\tau_{\min}$，从而取消这一项；这导致截断值：

$$\tau_{\min} = [\Gamma(\alpha)]^{-1/(1-\alpha)}\tau_D. \tag{6.112}$$

用这个截断，我们获得

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle r^2(t)\rangle = 2dD_0\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{\alpha-1}, \tag{6.113}$$

用 (6.107) 式，带来结果：

$$\langle r^2(t)\rangle = 2dD_0\tau_D\frac{1}{\alpha\Gamma(\alpha)}\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{\alpha} = \frac{\sigma^2}{\Gamma(1+\alpha)}\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{\alpha} \quad (0<\alpha<1). \tag{6.114}$$

这精确地与方程 (6.86) 一致. 这个结果显示：方程 (6.108) 中的扩散项在一定意义下是虚假的，它补偿了来源于不正确的短时区域结果；不过，演化的真正物理机制来自长尾非马尔可夫算符.

然而，方程 (6.108) 的适用性并没有完全解决. 虽然它产生了正确的密度轮廓的二次矩，但我们还是担心高阶矩. 为了确定后者，我们首先注意下列的等式：

$$\nabla^2 r^{2p} = 2p(2p+d-2)r^{2p-2}, \tag{6.115}$$

然后从方程 (6.108) 导出下面关于矩的的递推关系：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle r^{2p}(t)\rangle =& 2p(2p+d-2)D_0\\ &\times\left\{\langle r^{2p-2}(t)\rangle - \frac{1-\alpha}{\Gamma(\alpha)\tau_D}\int_{\tau_{\min}}^t \mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_D}{\tau}\right)^{2-\alpha}\langle r^{2p-2}(t-\tau)\rangle\right\}.\end{aligned} \tag{6.116}$$

矩的一般标度已在 (6.93) 式给出，即

$$\langle r^{2p}(t)\rangle = C_p t^{p\alpha}, \tag{6.117}$$

那么将之代入方程 (6.116)，有

$$
\begin{aligned}
p\alpha C_p t^{p\alpha-1} = & 2p(2p+d-2)D_0 \\
& \times\left\{C_{p-1}t^{(p-1)\alpha} - \frac{1-\alpha}{\Gamma(\alpha)}\tau_D^{1-\alpha}C_{p-1}\int_{\tau_{\min}}^t \mathrm{d}\tau\tau^{\alpha-2}(t-\tau)^{(p-1)\alpha}\right\}, \quad (6.118)
\end{aligned}
$$

且积分能被求出

$$
\begin{aligned}
\int_{\tau_{\min}}^t \mathrm{d}\tau\tau^{\alpha-2}(t-\tau)^{(p-1)\alpha} = & \frac{\Gamma(\alpha-1)\Gamma[1+\alpha(p-1)]}{\Gamma[\alpha+\alpha(p-1)]}t^{p\alpha-1} \\
& + \frac{\tau_{\min}}{1-\alpha}t^{\alpha(p-1)}{}_2F_1[-1+\alpha, -\alpha(p-1), \alpha, (\tau_{\min}/t)],
\end{aligned}
\tag{6.119}
$$

其中，${}_2F_1[\cdots]$ 是一个超几何函数，对于最后一个宗量的小值，其行为是 $1+O(\tau_{\min}/t)$. 因而方程 (6.118) 的渐进表示式为

$$
\begin{aligned}
p\alpha C_p t^{p\alpha-1} = & 2p(2p+d-2)D_0 C_{p-1}\left\{t^{(p-1)\alpha}\right. \\
& \left. -(1-\alpha)\tau_D^{\alpha-1}\frac{\Gamma(\alpha-1)\Gamma[1+\alpha(p-1)]}{\Gamma(\alpha)\Gamma(p\alpha)}t^{p\alpha-1} - \left(\frac{\tau_{\min}}{\tau_D}\right)^{\alpha-1}\frac{t^{(p-1)\alpha}}{\Gamma(\alpha)}\right\}.
\end{aligned}
\tag{6.120}
$$

我们再一次看到右边有两项正比于 $t^{(p-1)\alpha}$，这与左边的标度不一致. 所以它们的系数必须为零，则

$$
1-\left(\frac{\tau_{\min}}{\tau_D}\right)^{\alpha-1}\frac{1}{\Gamma(\alpha)} = 0. \tag{6.121}
$$

这得出与方程 (6.112) 相同的值. 这个结果是非常重要的：它保证了非马尔可夫扩散方程 (6.108) 结合截断定义 (6.112) 式，产生出密度轮廓的所有阶矩的正确结果.

现在容易看出，用一些伽马函数的等式，(6.120) 式简化为

$$
C_p = 2(p-1)(2p+d-1)\frac{\Gamma[\alpha(p-1)]}{\Gamma(\alpha p)}D_0\tau_D^{1-\alpha}C_{p-1}. \tag{6.122}
$$

这个递推关系是容易求解的，结果为

$$
C_p = \frac{2^p(p-1)!d(d+2)\cdots(d+2p-2)}{\alpha\Gamma(p\alpha)}(D_0\tau_D)^p\tau_D^{-\alpha}. \tag{6.123}
$$

将上式代入 (6.117) 式，从而获得 $2p$ 阶矩的一般形式：

$$
\langle r^{2p}(t)\rangle = \sigma^{2p}M_p\left(\frac{t}{\tau_D}\right)^{p\alpha}, \tag{6.124}
$$

其中，系数 M_p 为

$$M_p = \frac{d(d+2)\cdots(d+2p-2)}{d^p}\frac{(p-1)!}{\alpha\Gamma(p\alpha)}. \tag{6.125}$$

这个系数给出了任意扩散指数 α $(0<\alpha<1)$、任意阶 p 和任意维 d 的 SLT-CTRW 的所有矩的最终解. 仅需要强调的是所有矩与截断 $\tau_{\min}$ 无关.

讨论一些特殊情况是有趣的. 首先考虑平均平方位移，即 $p=1$，而维数任意的情况. 利用 $\alpha\Gamma(\alpha)=\Gamma(\alpha+1)$，(6.125) 式简化为

$$M_1 = \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)}, \quad p=1. \tag{6.126}$$

这个结果符合 (6.86) 式. 所以 MSD 是唯一的矩，其值与维数无关.

接下来，我们考虑对于任意维和 $\alpha=1$ 的情况. 我们有 $\alpha\Gamma(p\alpha)=\Gamma(p)=(p-1)!$，那么方程 (6.125) 简化为

$$M_p = \frac{d(d+2)\cdots(d+2p-2)}{d^p}, \quad \alpha=1, \quad \forall p, \tag{6.127}$$

这是一个十分有趣的结果. 为了导出扩散情况下的矩，人们可以从方程 (6.106) 出发，那儿非马尔可夫项被删去，因为 $H_0\sim(1-\alpha)$. 以致于我们剩下一个正常扩散方程，这样我们就导出一个递推方程，其是简单的且无非马尔可夫项：

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle r^{2p}(t)\rangle = 2p(2p+d-2)D_0\langle r^{2p-2}(t)\rangle. \tag{6.128}$$

对于 $p=1$，这个方程简化为 $\partial_t\langle r^2(t)\rangle=2dD_0$，从而获得著名的关于 MSD 的扩散形式：$\langle r^2(t)\rangle=2dD_0t$. 从这点出发，递推方程 (6.128) 能被成功地迭代求解，得出与 (6.127) 式相同的解. 奇异的行为是在推导 (6.125) 式时，在 (6.120) 式这一步，扩散项的贡献，即方程 (6.120) 右边第一项精确地被第三项消去了. 所以，(6.125) 式仅对 $\alpha<1$ 适用，完全地由演化方程的非马尔可夫项产生的结果决定. 此外，当外推到 $\alpha=1$，结果光滑地与纯粹的正常扩散情形相连接.

另外一个在应用中感兴趣的特殊情况是一维 $(d=1)$ 和任意 α 取值. 在这种情况下，注意到

$$\begin{aligned}\frac{d(d+2)\cdots(d+2p-2)(p-1)!}{d^p} &= 1\times3\times5\times\cdots\times(2p-1)\times1\times2\times3\times\cdots\times(p-1)\\ &= 1\times3\times5\times\cdots\times(2p-1)\times\frac{2\times4\times\cdots\times(2p-2)}{2^{p-1}} = \frac{(2p-1)!}{2^{p-1}},\end{aligned} \tag{6.129}$$

从而

$$M_p = \frac{(2p-1)!}{2^{p-1}}\frac{1}{\alpha\Gamma(p\alpha)}, \quad d=1, \quad \forall\alpha, \quad \forall p. \tag{6.130}$$

2. 马尔可夫与非马尔可夫演化的对比

现在说明本章的一些具体结论. 为了特殊化，选择下列 SLT-CTRW 过程的扩散指数值：

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad d = 1. \tag{6.131}$$

这个情况在几个物理应用中是令人感兴趣的，例如，电荷粒子在一个湍流磁场中的色散.

SLT-CTRW 的一般渐进解已在上节推导出；一维的结果由方程 (6.96) 给出，对于 $\alpha = \frac{1}{2}$，其简化为

$$n_{\mathrm{SLT}}(x;t) = \frac{1}{\sigma}\frac{1}{2^{5/2}\Gamma(7/4)}\left(\frac{\tau_D}{t}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{q^{4/3}}{4}\right), \tag{6.132}$$

其中由方程 (6.89) 定义的相似变量 q 为

$$q = \left(\frac{\tau_D}{t}\right)^{1/4}\frac{x}{\sigma}. \tag{6.133}$$

我们知道 SLT 密度轮廓总是能被非马尔可夫扩散方程 (6.108) 结合截断方程 (6.112) 的传播子所刻画. 在目前的情况下，这个方程写作

$$\frac{\partial}{\partial t}n_{\mathrm{SLT}}(x;t) = D_0\nabla_x^2 n_{\mathrm{SLT}}(x;t) - H_0\int_{\pi^{-1}}^{t}\mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_D}{\tau}\right)^{3/2}\nabla_x^2 n_{\mathrm{SLT}}(x;t-\tau), \tag{6.134}$$

其中，

$$D_0 = \frac{\sigma^2}{2\tau_D}, \quad H_0 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\tau_D}D_0. \tag{6.135}$$

注意到慢衰减、长尾记忆核按 $\tau^{-3/2}$ 规律下降.

非马尔可夫方程会出现在许多问题和模型中，例如，动力理论的普里高津–Résibois 主方程；在输运理论中关于热力流的非马尔可夫方程；混合动力方程与方程 (6.108) 相似. 在所有这些情况下，人们经常用一个马尔可夫近似去简化这些方程. 原因是由于存在两个分离的时间尺度：记忆核被假设在一个时间段内衰减，而这个时间相对于未知函数变化的特征时间而言很短. 后者的延迟能被忽略，从而方程是马尔可夫化的.

现利用上述方案到方程 (6.108)，这里考虑 $0 < \alpha < 1$ 和任意的 d 值. 在积分中用 $n(x;t)$ 代替 $n(\boldsymbol{x};t-\tau)$，并用 $n_M(\boldsymbol{x};t)$ 来代表，则导致的马尔可夫化方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}n_M(\boldsymbol{x};t) = D_0[1-A(t)]\nabla^2 n_M(\boldsymbol{x};t), \tag{6.136}$$

其中，

$$
\begin{aligned}
1-A(t) &= 1-\frac{1-\alpha}{\tau_{D}\Gamma(\alpha)}\int_{\tau_{\min}}^{t}\mathrm{d}\tau\left(\frac{\tau_{D}}{\tau}\right)^{2-\alpha} \\
&= 1-\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\left(\frac{\tau_{D}}{\tau_{\min}}\right)^{1-\alpha}+\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\left(\frac{\tau_{D}}{t}\right)^{1-\alpha}.
\end{aligned}
\tag{6.137}
$$

注意我们并没有令积分上限为无穷等更偏激的步骤. 由于 (6.112) 式的截断值，上式右边前两项精确地抵消，因而剩下

$$
\frac{\partial}{\partial t}n_{M}(\boldsymbol{x};t)=\frac{D_{0}}{\Gamma(\alpha)}\left(\frac{\tau_{D}}{t}\right)^{1-\alpha}\nabla^{2}n_{M}(\boldsymbol{x};t).
\tag{6.138}
$$

故演化方程的马尔可夫化导致一个时间有关扩散系数的扩散方程. 注意这个系数按 $t^{-1+\alpha}$ 趋于零，其实方程 (6.138) 描写了一个欠扩散过程. 这就是完全的马尔可夫化 (即在积分中令 $t\to\infty$)，可能导致无意义的结果. 这在计算 $1-A(t)$ 中也能看到，若 $t=\infty$，则其值为零，所以完全的马尔可夫化仅适用于一个规则的扩散过程.

方程 (6.138) 能被解析求解. 作变量变换：$t\to T=t^{\alpha}$，将 $\nu(\boldsymbol{x};T)=n_{M}(\boldsymbol{x};T^{1/\alpha})$ 变换到扩散方程，其具有一个常量扩散系数，则

$$
\frac{\partial}{\partial T}\nu(\boldsymbol{x};T)=D\nabla^{2}\nu(\boldsymbol{x};T),
\tag{6.139}
$$

其中，

$$
D=\frac{D_{0}}{\Gamma(\alpha+1)}\tau_{D}^{1-\alpha}.
\tag{6.140}
$$

这个方程的传播子已在方程 (6.36)($\boldsymbol{V}=0$) 中给出；在所得的方程中，我们恢复原来的时间变量，则

$$
n_{M}(\boldsymbol{x};t)=\sigma^{-d}\left[\frac{d\Gamma(\alpha+1)}{\pi}\right]^{d/2}\left(\frac{\tau_{D}}{t}\right)^{\alpha d/2}\exp\left[-\frac{d\Gamma(\alpha+1)}{2}q^{2}\right].
\tag{6.141}
$$

以上函数具有 (6.87) 式表示的正确的标度形式，其中相似变量 q 的定义见 (6.89) 式. 然而，标度函数 $F(q)$ 非常不同于 (6.90) 式的形式；马尔可夫传播子是高斯的，代替扩展的指数函数 $\exp(-bq^{\delta})$，这里 $\delta=2/(2-\alpha)$. 不过，注意这个过程的 MSD 按 t^{α} 随时间增长，这符合欠扩散行为. 此外，方程 (6.139) 不能通过任何极限过程，而从非马尔可夫方程的正确解来获得. 在特殊情况下，例如，(6.141) 式所示的过程，马尔可夫密度轮廓简化为

$$
n_{M}(\boldsymbol{x};t)=\sigma^{-1}\frac{1}{(2\sqrt{\pi})^{1/2}}\left(\frac{\tau_{D}}{t}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{\sqrt{\pi}}{4}q^{2}\right),\quad \alpha=\frac{1}{2},\quad d=1.
\tag{6.142}
$$

其显示了非常清晰的 SLT-CTRW 密度轮廓的长尾，然而这种行为在马尔可夫“近似”中的确是缺少的.

本节的主要结论是马尔可夫近似在 SLT-CTRW 中完全是不适当的. 其中的原因是等待时间的长尾分布，这必然带来记忆核有一个时间幂律依赖的结果. 这样一来，该函数就没有特征长度，因而不能像以往处理非马尔可夫方程那样定义两个分离的时间尺度. 这个欠扩散和输运与正常的有着本质的不同.

下面着眼于这个问题. 考虑一个由方程 (6.71) 和 (6.72) 定义的扩散 CTRW. 在傅里叶–拉普拉斯表象中，它满足演化方程 (6.69)，记忆核如下：

$$\hat{\phi}(s) = \frac{s\hat{\psi}(s)}{1-\hat{\psi}(s)} = \frac{1}{\langle t \rangle} - s = \frac{1}{\langle t \rangle}[1+O(s)]. \tag{6.143}$$

当 $s \to 0$，剩余项为常数 $\langle t \rangle^{-1}$. 将方程 (6.143) 代入方程 (6.69)，有

$$s\hat{\hat{n}}(\boldsymbol{k};s) - 1 = -\frac{\langle r^2 \rangle}{2d\langle t \rangle}k^2\hat{\hat{n}}(\boldsymbol{k};s), \tag{6.144}$$

它就是扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t}n(r;t) = D\nabla^2 n(r;t) \tag{6.145}$$

的傅里叶–拉普拉斯变换.

将方程 (6.143) 与 SLT-CTRW 的记忆核 (6.99) 式相比较，我们看到后者的行为是 $s^{1-\alpha}$，当 $s \to 0$，其趋于零，故最主要项需要与 s 有关，这意味着一个非马尔可夫演化方程. 这个论点清楚地显示了马尔可夫近似仅对正常扩散过程适用.

6.4 分数阶扩散方程

第 6.3 节建立了一个连续时间无规行走的分布密度函数所满足的广义主方程，体现了时空的非马尔可夫性，不过，这是一个积分方程. 如果事先知道行走者等待时间分布的拉普拉斯变换的前二阶项，或者跳跃长度分布的傅里叶变换的低阶项，那么就能够写出形式上更为简洁的关于分布函数随时演化的分数阶扩散方程. 注意前者用时间分数阶导数，而后者用空间分数阶导数 (与空间的长跳跃莱维过程相关).

与欠扩散相反，对于有限的特征等待时间 T 和发散的跳跃长度方均 Σ^2，前者能用泊松分布，后者用莱维分布来模型，即

$$\lambda(k) = \exp(-\sigma^\mu |k|^\mu) \sim 1 - \sigma^\mu |k|^\mu, \tag{6.146}$$

$1 < \mu < 2$ 对应的渐进行为是

$$\lambda(x) \sim \frac{A_\mu}{\sigma^\mu |x|^{1+\mu}}, \quad |x| \gg \sigma. \tag{6.147}$$

由于平均等待时间 T 有限，则这个过程具有马尔可夫特性. 将渐进公式 (6.146) 代入方程 (6.50)，我们得到

$$W(k,u)=\frac{1}{u+K^{\mu}|k|^{\mu}} \tag{6.148}$$

对其实施逆傅里叶–拉普拉斯变换，则推断分数阶扩散方程为

$$\frac{\partial W}{\partial t}=K^{\mu}{}_{-\infty}D_x^{\mu}W(x,t), \tag{6.149}$$

其中，一维空间的外尔 (Weyl) 算符 ${}_{-\infty}D_x^{\mu}$ 等价于里斯算符 ∇^{μ}.[①]这里，广义扩散常数是

$$K^{\mu}\equiv\sigma^{\mu}/\tau, \tag{6.150}$$

具有的量纲是 $[K^{\mu}]=\mathrm{cm}^{\mu}\cdot\mathrm{s}^{-1}$. 传播子的傅里叶变换能被容易地计算，其为

$$W(k,t)=\exp(-K^{\mu}t|k|^{\mu}), \tag{6.151}$$

这是中心位于原点的对称莱维分布的特性函数，可用来产生莱维飞行.

在图 3.1，一个莱维飞行的计算机模拟被显示在该图 (b) 中，与一个具有有限跳跃长度方差的一个行走者在相同的跳跃步数的轨道 (图 3.1(a)) 进行了比较. 由于在跳跃长度密度分布函数的渐进行为 (6.147) 式中，非常长的跳跃可能以一个相当大的概率发生，这个概率要比高斯分布的指数衰减的概率大得多，所以由 (6.147) 式表示的跳跃长度分布密度函数的标度属性导致了莱维飞行的团簇特性，即局部运动偶尔被长的飞行所中断. 以至于人们发现在团簇内又有局部运动的团簇. 事实上，莱维飞行轨道能归属为一个分数阶维 $d_f=\mu$ 的图形. 反之，画在图 3.1(a) 的轨道，它的 $\Sigma^2<\infty$，轨道完全充满了二维空间，因为所有的跳跃具有大约相同的长度.

分数阶扩散方程 (6.149) 在 (x,t) 空间的解能用 Fox 函数解析地表示，结果是

$$W(x,t)=\frac{1}{\mu|x|}H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{|x|}{(K^{\mu}t)^{1/\mu}}\left|\begin{matrix}(1,1/\mu),(1,1/2)\\(1,1),(1,1/2)\end{matrix}\right.\right]. \tag{6.152}$$

这是莱维稳定律的一个闭合形式的表示. 当 $\mu\to2$，基于标准的 Fox 函数，恢复到经典高斯解. 从 (6.152) 式，我们能推断出解的幂律渐进形式：

$$W(x,t)\sim\frac{K^{\mu}t}{|x|^{1+\mu}},\quad \mu<2, \tag{6.153}$$

其为典型的莱维分布. 由于这个性质，方均位移发散，即

$$\langle x^2(t)\rangle\to\infty. \tag{6.154}$$

① 注意：需禁止在傅里叶空间的虚单位，所以要采用稍微修正的定义：$F\{{}_{-\infty}D_x^{\mu}f(x)=-|k|^{\mu}f(k)\}$ 代替 $F\{{}_{-\infty}D_x^{\mu}f(x)=\mathrm{i}^{\mu}|k|^{\mu}f(k)\}$.

这就产生了一些争论，因为通过截断获得的各种量与之是不同的. 从简单方法获得的标度关系，或一个分数阶矩的标度为

$$\langle|x|^{\delta}\rangle \propto t^{\delta/\mu}, \quad 0<\delta<\mu \leqslant 2, \tag{6.155}$$

但是这损失了被成为“方均位移”的意义. 明显地，方程 (6.155) 不能适用于一个具有非发散质量的粒子. 对于如此质量的粒子，一个有限的传播速度存在，进而不可能发生长的瞬间跳跃.

分数阶矩的精确计算能利用 Fox 函数的定义，写作

$$\langle|x|^{\delta}\rangle = 2\int_0^{\infty} \mathrm{d}x x^{\delta} W(x,t), \quad 0<\delta, \tag{6.156}$$

由于 (6.153) 式，这个积分仅当 $\delta=\mu$ 才收敛. 在这种情况下，注意通过 (6.152) 式，积分 (6.156) 式定义了 Fox 函数的 Mellin 变换，而 Mellin 变换的一般表示式为

$$M\{f(t),s\} = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t t^{s-1} f(t), \tag{6.157}$$

则将 (6.152) 式代入 (6.156) 式，有

$$\begin{aligned}\langle|x|^{\delta}\rangle &= \frac{2}{\mu}\int_0^{\infty} \mathrm{d}x x^{\delta-1} H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{|x|}{(K^{\mu}t)^{1/\mu}}\left|\begin{matrix}(1,1/\mu),\ (1,1/2)\\(1,1),\ (1,1/2)\end{matrix}\right.\right]\\ &\equiv \frac{2}{\mu} M\left\{H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{|x|}{(K^{\mu}t)^{1/\mu}}\right]\right\}.\end{aligned} \tag{6.158}$$

使用如下 Fox 函数的性质

$$\int_0^{\infty} \mathrm{d}x x^{s-1} H_{p,q}^{m,n}\left[ax\left|\begin{matrix}(a_p,A_p)\\(b_q,B_q)\end{matrix}\right.\right] = a^{-s}\chi(-s), \tag{6.159}$$

其中，$\chi(s)$ 定义为附录 B 中 (B.2) 式，人们容易推断

$$\langle|x|^{\delta}\rangle = \frac{2}{\mu}(K^{\mu}t)^{\delta/\mu}\chi(-\delta) = \frac{2}{\mu}(K^{\mu}t)^{\delta/\mu}\frac{\Gamma(-\delta/\mu)\Gamma(1+\delta)}{\Gamma(-\delta/2)\Gamma(1+\delta/2)}. \tag{6.160}$$

由于条件 $0<\delta<\mu$，$\langle|x|^{\delta}\rangle$ 总为正的，而且从 (6.160) 式可以看出：尽管 $\langle|x|^{\delta}\rangle \propto t^{\delta/\mu}$，关于 t 总是欠线性的，但是这个分数阶矩的标度导致伪位移平方平均 $\langle x^2\rangle \propto t^{2/\mu}$，即超扩散.

考虑两个特殊情况. 当 $\delta\to 0$，人们可从 (6.160) 式证实归一化：

$$\lim_{\delta\to 0}\langle|x|^{\delta}\rangle = 1, \tag{6.161}$$

这里用到了 $z\ll 1$，$1/\Gamma(z)\sim z$. 在高斯极限 $\mu=2$，给出的方均位移具有线性时间依赖性：

$$\lim_{\substack{\delta\to 2\\ \mu\to 2}}\langle|x|^{\delta}\rangle = 2K_1 t. \tag{6.162}$$

对于一定的系统，例如，单分子光谱学中遇到的能量空间的扩散，在化学空间中聚合物链上的扩散，方均位移的发散性并不违背物理原理. 可是，如果在实空间处理具有质量的粒子，物理要求一个有限的传播速度. 后面的这个矛盾能用莱维行走代替莱维飞行来克服，即一个具有时空耦合的连续时间无规行走模式，可通过一个 δ 耦合来实现：$\psi(x,t)=\dfrac{1}{2}w(t)\delta(|x|-vt)$，这意味着一个时间代价处罚长跳跃. 这种情况的例子有：约瑟夫森结的混沌相扩散、湍流、混沌哈密顿系统等. 所以连续时间无规行走主要涉及欠扩散系统，而莱维行走将另行讨论.

莱维飞行的边界值问题比欠扩散的更加棘手，主要是因为长跳跃使得边界的定义十分复杂. 这个问题在下节用一个膨胀盒子来讨论.

长休息和长跳跃之间的竞争

在讨论莱维飞行所遇到的方均位移发散的问题，会在考虑坐标与时间标度关系时被避开，或者测量分布密度函数 $W(x,t)$ 的宽度，而不是它的方差. 一个可供选择的方法是用如下的定义：

$$\langle x^2(t)\rangle_L \sim \int_{L_1 t^{1/\mu}}^{L_2 t^{1/\mu}} \mathrm{d}x x^2 W(x,t) \sim t^{2/\mu}. \tag{6.163}$$

按照这一思想，行走者被考虑在一个假想的膨胀盒子里，则导致方均位移 $\sim t^{2/\mu}$ 的行为. 注意在 (6.163) 式的积分截断是时间有关的. 假想的盒子横跨空间间隔 $\Delta(t)=(L_1-L_2)t^{1/\mu}$，其随着时间的推移而增长. 这给出一个测量，概率的一个有限部分被聚集在给定的间隔 $\Delta(t)$ 内.

利用这个关系，人们能考虑一个无规行走，导致无限大的平均等待时间 T 和跳跃二次矩，分数阶扩散方程为

$$\frac{\partial W}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha} K_\alpha^\mu \nabla^\mu W(x,t), \tag{6.164}$$

其中，$K_\alpha^\mu \equiv \sigma^\mu/\tau^\alpha$. 在这个情况下，合适地定义量 $\langle x^2(t)\rangle_L$，我们称之为伪方均位移，具有瞬间形式：

$$\langle x^2(t)\rangle_L \sim t^{2\alpha/\mu}. \tag{6.165}$$

注意在 (6.165) 式中，指数 α 被固定，然而莱维指数 μ 表明了伪平方平均位移的技巧. 相反地，在莱维行走图像中，层流事件 (“飞行”) 和局域化 (等待) 时间的竞争，通过下面的关系式体现出来：

$$\langle x^2\rangle = \begin{cases} t^{2+\alpha-\mu}, & 1<\mu<2, \quad 0<\alpha<1; \\ t^{3-\mu}, & 1<\mu<2, \quad \alpha>1, \end{cases} \tag{6.166}$$

这里，花费在层流事件的时间由分布密度函数 $\psi(t) \sim at^{-\mu-1}$ 来产生；等待时间由分布密度函数 $\tilde{\psi}(t) \sim bt^{-\alpha-1}$ 抽样产生. 莱维行走的 (6.166) 式明显地不同于进入 (6.165) 式的指数 α 和 μ 除在一起的属性.

6.5 关联连续时间无规行走

6.5.1 耦合朗之万方程

本节基于耦合朗之万方程，考虑一个指数为 f 的幂律莱维步幅分布和指数为 g 的幂律等待时间分布，对一个随机行走长时间行为的结合效应. 在 $f < 2$ 和 $g < 1$ 的反常情况下，动力学指数 z 锁定在比值 f/g 上.

用 $\pi(\eta)$ 代表步幅尺寸分布，其中 η 是基本的微观步幅. 假设 $\pi(\eta)$ 是归一化的，即 $\int \pi(\eta)\mathrm{d}\eta = 1$；等待时间分布用 $w(\tau)$ 表示，$w(\tau)$ 也就是行走者在一个给定位置上完成下一个跳跃前等待的时间为 τ 的概率. 显然，$\tau > 0$，$\int_0^\infty w(\tau)\mathrm{d}\tau = 1$.

用路径参数或沿着轨道的弧长度 s，在连续化极限下，对随机行走进行参数化，经过 s 步行走者的位置为

$$r(s) = \int_0^s \eta(s')\mathrm{d}s', \tag{6.167}$$

或者朗之万方程

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}s} = \eta(s). \tag{6.168}$$

相似地，在连续极限下，经过 s 步所用去的时间是

$$t(s) = \int_0^s \tau(s')\mathrm{d}s', \tag{6.169}$$

这意味着朗之万方程

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} = \tau(s). \tag{6.170}$$

耦合朗之万方程 (6.168) 和 (6.170) 组成了连续时间行走的框架. 我们考虑分离的情况，即跳跃分布 $\pi(\eta)$ 和等待时间分布 $w(\tau)$ 是统计独立的.

在一个尖的等待时间分布 $w(\tau) = \delta(\tau - \tau_0)$ 情况下，这对应着一个固定的跳跃速率 $1/\tau_0$，方程 (6.170) 为确定性的，它对 s 能被求解，即 $t = \tau_0 s$. 通过内插得到正常朗之万方程

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\tau_0}F(r) + \frac{1}{\tau_0}\eta(t). \tag{6.171}$$

在非传统的等待时间分布的情况下，我们必须讨论耦合方程. 现在关注等待时间和跳跃步长的幂律分布. 对于步幅 η，假设为一个幂律分布：

$$\pi(\eta)\mathrm{d}^d\eta \propto \eta^{-1-f} d^d\eta, \tag{6.172}$$

其为由步幅指数 f 所完全确定的各向同性分布. 为了保证归一化，我们引入一个较低幅切断 $\eta \sim a$(a 为系统的微观尺度)，并且选 $f > 0$. 当 $f > 2$，二次矩 $\langle \eta^2 \rangle = \int \pi(\eta)\eta^2 \mathrm{d}^d\eta$ 是有限的，其特征跳跃尺寸由方均根 $\sqrt{\langle \eta^2 \rangle}$ 所给出；当 $1 < f < 2$，二次矩发散，而平均步幅 $\langle \eta \rangle$ 有限；在 $0 < f < 1$ 间隔内，一次矩发散，以致于平均跳跃步长不能被定义.

同样，假设等待时间 τ 具有幂律分布：

$$w(\tau)\mathrm{d}\tau \propto \tau^{-1-g}\mathrm{d}\tau, \tag{6.173}$$

这归于 $\tau > 0$ 的因果关系. 为了保证归一化，引入一个量级为微观时间尺度的短时切断，并且 $g > 0$. 分布完全由时间指数 g 来刻画. 当 $g > 1$，一次矩 $\langle \tau \rangle = \int w(\tau)\tau \mathrm{d}\tau$ 有限，其倒数 $1/\langle \tau \rangle$ 就是跳跃速率；当 $0 < g < 1$，平均值 $\langle \tau \rangle$ 发散，也就不能定义一个特征速率或时间标度.

为了最终讨论一个在幂律噪声 η 和 τ 驱动下的无规行走者的反常扩散行为，我们必须确定分布函数 $P(r,t)$，尤其是方均位移

$$\langle r^2(t) \rangle \propto Dt^{2/z}, \tag{6.174}$$

其中，D 是扩散系数，z 为动力学指数. 因为随机行走发生在物理时间 t，需消除标注行走的辅助路径变量 s. 由于关于 t 的朗之万方程的随机属性，那是不可能将 s 代入并求解，所以必须转向考虑对应的福克尔–普朗克方程.

令对应于朗之万方程 (6.168) 和 (6.170) 的概率分布分别是 $P_1(r,s)$ 和 $P_2(t,s)$，从定义 $P_1(r,s) = \langle \delta(r - r(s)) \rangle$ 和 $P_2(t,s) = \langle \delta(t - t(s)) \rangle$ 出发，对方程 (6.167) 和 (6.169) 中的幂律噪声求平均，导出以下的标度形式：

$$P_1(r,s) = \int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d} \exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - k^\mu s) = s^{-d/\mu} G_1\left(\frac{r}{s^{1/\mu}}\right), \tag{6.175}$$

$$P_2(t,s) = \int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \exp[-\mathrm{i}\omega t - (-\mathrm{i}\omega)^\nu s] = s^{-1/\nu} G_2\left(\frac{t}{s^{1/\nu}}\right). \tag{6.176}$$

选择 t 和 s 的合适标度，将系数 k^μ 和 $(-\mathrm{i}\omega)^\nu$ 固定成为单位 1.

标度指数 μ 和 ν 分别依赖于步幅指数 f 和时间指数 g，即方程 (6.172) 和 (6.173) 中的幂律步幅和等待时间分布. 当 $f > 2$，方均步幅有限，μ 的值锁定在 2，那么标度函数 G_1 就是表征布朗行走的高斯函数，$G_1(x) = \exp(-x^2)$. 这是中心极限定理的结果，定义了布朗运动的普遍行为. 当 $f < 2$，标度指数 $\mu = f$，并且标度函数 G_1 仅对于 $\mu = 1$ 和 $\mu = 1/2$，即柯西和 Smirnov 分布 (Shlesinge et al., 1982)

能用已知函数给出显式. 然而，当 $x\to 0$，G_1 为一常数；当 $x\to\infty$，$G_1\to 0$. 从方程 (6.175) 的分布，我们基于路径变量 s 推断出行走者的方均位移的标度形式：

$$\langle r^2(s)\rangle=\int P_1(\boldsymbol{r},s)r^2\mathrm{d}^d r\propto s^{2/\mu}. \tag{6.177}$$

相似的讨论可以应用于 $P_2(t,s)$. 当 $g>1$，即一次矩有限的情况，具有确定的跳跃速率，标度指数 ν 锁定在 1，则标度函数 $G_2(x)=\delta(1-x)$. 这是中心极限定理的结果，导致了通常的时间行为；当 $g<1$，标度指数 ν 锁定在 g，即 $\nu=g$，得到一个非传统标度形式. 基于路径变量，我们有方均时间：

$$\langle t^2(s)\rangle=\int P_2(\boldsymbol{r},s)t^2\mathrm{d}t\propto s^{2/\nu}. \tag{6.178}$$

这启发我们利用方程 (6.178) 去推断像 $s^{1/\nu}$ 一样关于 t 的标度，为此在方程 (6.177) 中消除 s，进而得到标度关系：

$$\langle r^2(t)\rangle\propto t^{2\nu/\mu}. \tag{6.179}$$

按照方程 (7.174)，动力学指数为

$$z=\frac{\mu}{\nu}. \tag{6.180}$$

6.5.2 标度分析

现在来证明行走者的分布密度函数 $P(r,t)$ 的确满足如下的标度律：

$$P(\boldsymbol{r},t)\equiv t^{-\frac{d\nu}{\mu}}G\left(\frac{r}{t^{\nu/\mu}}\right). \tag{6.181}$$

我们写出 $P_1(r,s)$ 和 $P_2(t,s)$ 遵守的福克尔–普朗克方程. 引入分数阶非局域微分算符

$$\nabla^\mu=-\int\frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}k^\mu, \tag{6.182}$$

$$D^\nu=-\int\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}(-\mathrm{i}\omega)^\nu. \tag{6.183}$$

相对于长程莱维梯跳和等待时间，我们有

$$\frac{\partial P_1(\boldsymbol{r},s)}{\partial s}=\nabla^\mu P_1(\boldsymbol{r},s), \tag{6.184}$$

$$\frac{\partial P_2(t,s)}{\partial s}=D^\nu P_2(t,s). \tag{6.185}$$

在布朗运动情况 $\mu=2$ 和 $\nu=1$ 下，∇^μ 退化到通常的拉普拉斯算符 Δ，其描写正常扩散，而 D^ν 成为一阶微分算符 $-\partial/\partial t$.

为了计算行走者的概率分布，其作为物理时间的函数，我们必须消除路径变量 s. 换句化说，我们得去推导分布 $P_3(s,t)$，因为它与 $P(\boldsymbol{r},t)$ 存在如下关系

$$P(\boldsymbol{r},t)=\int_0^\infty \mathrm{d}sP_1(\boldsymbol{r},s)P_3(s,t). \tag{6.186}$$

这是基于一个事实：行走者在时刻 t 到达 r 的概率，等于在时刻 t 路径为 s 的概率乘以这条路径长度 s 在 r 处的概率，对所有路径长度求和. 为了推导 $P_3(s,t)$，我们用任意步长和等待时间的一般公式 $P(\boldsymbol{r},t)$，在傅里叶空间有

$$P(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{-\mathrm{i}\omega}\frac{1-w(\omega)}{1-w(\omega)\pi(\boldsymbol{k})}, \tag{6.187}$$

其中，$\pi(\boldsymbol{k})$ 和 $w(\omega)$ 分别是步幅和等待时间分布的傅里叶变换，即

$$\pi(\boldsymbol{k})=\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\eta}}\pi(\boldsymbol{\eta})\mathrm{d}^d\eta, \tag{6.188}$$

$$w(\omega)=\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}w(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{6.189}$$

注意到因果关系，当 $\tau<0$，有 $w(\tau)=0$，方程 (6.189) 退化为拉普拉斯变换，而 ω 定义为上半复 ω 平面沿平行于 x 轴的周线.

就方程 (6.188) 和 (6.189) 的幂律分布来讲，我们获得：对于小 k，$\pi(k)=1-k^\mu$；对于小 ω，$w(\omega)=1-(-\mathrm{i}\omega)^\nu$，包含 ω 和 k 的最主要项，则分布函数的双傅里叶变换为

$$P(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{(-\mathrm{i}\omega)^{\nu-1}}{(-\mathrm{i}\omega)^\nu+k^\mu}. \tag{6.190}$$

将方程 (6.175) 的 $P_1(\boldsymbol{r},s)$ 代入方程 (6.186)，需要 $P(\boldsymbol{r},t)$ 的傅里叶变换形式，则 $P_3(s,t)$ 为

$$P_3(s,t)=\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}(-\mathrm{i}\omega)^{\nu-1}\mathrm{e}^{-(-\mathrm{i}\omega)^\nu s}. \tag{6.191}$$

从方程 (6.186)，有

$$P(\boldsymbol{r},t)=\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^dk}{(2\pi)^d}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t+\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\frac{(-\mathrm{i}\omega)^{\nu-1}}{(-\mathrm{i}\omega)^\nu+k^\mu}, \tag{6.192}$$

这导致具有如下标度函数的方程 (6.181) 的标度形式

$$G(x)=x^{-d}\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{d}^dk}{(2\pi)^d}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega+\mathrm{i}k}}{(-\mathrm{i}\omega)[1+x^{-\mu}k^\mu/(-\mathrm{i}\omega)^\nu]}. \tag{6.193}$$

给出方均位移：

$$\langle \boldsymbol{r}^2(t)\rangle=\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{r}P(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{r}^2\propto t^{2/z}, \tag{6.194}$$

动力学指数 $z=\mu/\nu$，符合方程 (6.174) 的猜测结果.

讨论

沿着 $\mu=2\nu$ 线，有 $z=2$，连续时间莱维飞行与标准的布朗运动有相同的标度特性；由长程莱维跳跃引起的超扩散行为被长等待时间所平衡. 然而注意到标度函数 G 对于 $\mu=2\nu$ 的情况，仅在 $\mu=2$ 和 $\nu=1$ 时才成立，此即高斯分布. 当 $\mu>2\nu$，即 $z>2$，莱维飞行成功，获得超扩散；当 $\mu<2\nu$，$z<2$，长等待时间占优，给出欠扩散.

第 7 章　分数阶微积分

本章导读：为了在牛顿力学中包含历史记忆效应、满足宏观与微观时间尺度不可严格区分的需求，引入分数阶导数，它是用一个积分，即黎曼–刘维尔积分来定义计算的. 列出分数阶导数的性质：线性律、合成律、莱布尼茨规则、复合函数的分数阶导数；给出在实际中发挥重要作用的拉普拉斯和傅里叶变换. 作为举例，求解线性分数阶微分方程，还将分数阶导数作为一个运算器，显示输入输出波型图.

分数阶导数和积分通称分数阶计算，但不是分式计算的意思，既不是任何计算 (如微分、积分等) 的分式，也不是对分式的计算. 分数阶计算是以任意阶积分和微分来命名的，它是整数阶微分和 n 重积分的推广.

人们非常熟悉整数阶导数，$\mathrm{d}^n y/\mathrm{d}x^n$，和其积分逆运算，但是一般并不知晓分数阶导数，例如 $\mathrm{d}^{1/2}y/\mathrm{d}x^{1/2}$. 所有的分数阶微积分都困难吗？事实上，分数阶导数和积分与微积分一样地古老. 早在 1695 年，Gottfried 和 Leibnitz，在答复 Guillaume de I'Hôpital 时写道：$\mathrm{d}^{1/2}x$ 等于 $x\sqrt{\mathrm{d}x/x}$，总有一天有用的结果将会出现. 300 多年过去了，人们慢慢认识到分数阶微积分在物理上作为一个实用工具的价值.

现有 n 重积分和 n 阶导数的无限序列：

$$\cdots,\int_a^t \mathrm{d}\tau_2\int_a^{\tau_2} f(\tau_1)\mathrm{d}\tau_1,\int_a^t f(\tau_1)\mathrm{d}\tau_1, f(t),\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t},\frac{\mathrm{d}^2 f(t)}{\mathrm{d}t^2},\cdots \tag{7.1}$$

任意实数 (非整数) α 阶导数能被考虑成这个算符序列的内插，用如下的记号表示：

$$ {}_aD_t^{\alpha} f(t). \tag{7.2}$$

任意实数阶 ($\alpha>0$) 导数的简短名称就是分数阶导数. (7.2) 式中的下脚标 a 和 t 代表分数阶微分算符表示成一个定积分的下限和上限，更明确地说，t 代表了被微分变量.

分数阶序积分的意思是任意整数重积分的内插，对应于负的 α. 我们用一个分离的记号来表示分数阶积分，即用如下 $\beta>0$ 的分数阶积分表示：

$$ {}_aD_t^{-\beta} f(t). \tag{7.3}$$

分数阶微分方程是一个包含分数阶导数的方程；分数阶积分方程是指包含分数阶积分的方程. 一个分数阶序系统意味着含分数阶微分或积分的方程.

7.1 Grünwald-Letnikov 分数阶导数

7.1.1 整数阶导数和积分的统一

我们现在给出将 n 阶导数和 n 重积分统一起来的一种方案，这里 n 为整数. 让我们考虑一个连续函数 $y=f(t)$. 按照导数是差商的极限的思想，则 $f(t)$ 的一阶导数定义为

$$f'(t)=\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=\lim_{h\to 0}\frac{f(t)-f(t-h)}{h}, \tag{7.4}$$

二阶导数的定义为

$$f''(t)=\lim_{h\to 0}\frac{f'(t)-f'(t-h)}{h}=\lim_{h\to 0}\frac{f(t)-2f(t-h)+f(t-2h)}{h^2}, \tag{7.5}$$

利用二项式系数，n 阶导数记为

$$f^{(n)}(t)=\frac{\mathrm{d}^n f}{\mathrm{d}t^n}=\lim_{h\to 0}\frac{1}{h^n}\sum_{r=0}^{n}(-1)^r\begin{pmatrix} n \\ r \end{pmatrix}f(t-rh), \tag{7.6}$$

这里

$$\begin{pmatrix} n \\ r \end{pmatrix}=\frac{n(n-1)(n-2)\cdots(n-r+1)}{r!} \tag{7.7}$$

为二项式系数的通常记号.

将 (7.6) 式推广到任意 $p\leqslant n$ 的整数阶导数，有

$$f_h^{(p)}(t)=\lim_{h\to 0}\frac{1}{h^p}\sum_{r=0}^{n}(-1)^r\begin{pmatrix} p \\ r \end{pmatrix}f(t-rh), \tag{7.8}$$

这里求和到 n，是因为二项式系数 (7.7) 式在 $r\geqslant n$ 情况下等于零.

让我们考虑负 p 值，为便于区分，记

$$\begin{pmatrix} -p \\ r \end{pmatrix}=\frac{-p(-p-1)\cdots(-p-r+1)}{r!}=(-1)^r\begin{bmatrix} p \\ r \end{bmatrix}, \tag{7.9}$$

其中，

$$\begin{bmatrix} p \\ r \end{bmatrix}=\frac{p(p+1)\cdots(p+r-1)}{r!}, \tag{7.10}$$

则

$$f_h^{(-p)}(t)=\lim_{h\to 0}\frac{1}{h^{-p}}\sum_{r=0}^{n}\begin{bmatrix} p \\ r \end{bmatrix}f(t-rh), \tag{7.11}$$

这里 p 是一个正整数.

如果 n 固定，那么当 $h \to 0$，$f_h^{(-p)}$ 也趋于零，也就无意义了. 为了达到非零极限，我们需设想当 $h \to 0$ 时，$n \to \infty$. 可以选 $h = \dfrac{t-a}{n}$，这里 a 是一个实常数，因而 $f_h^{(-p)}$ 的极限值为有限或者无穷. 这样一来，我们记作

$$\lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} f_h^{(-p)}(t) = {}_aD_t^{-p} f(t), \tag{7.12}$$

这里，${}_aD_t^{-p}$ 事实上代表作用在 $f(t)$ 上的一个算符，a 和 t 是两个端点.

让我们考虑几种特殊情况.

(1) $p=1$，$t-nh=a$，有

$${}_aD_t^{-1} f(t) = \lim_{h\to 0} h \sum_{r=0}^{n} f(t-rh) = \int_0^{t-a} f(t-z)\mathrm{d}z = \int_a^t f(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{7.13}$$

(2) $p=2$，在这种情况下，

$$\left[\begin{array}{c} 2 \\ r \end{array}\right] = \frac{n(n-1)(n-2)\cdots(n-r+1)}{r!} = r+1, \tag{7.14}$$

因而

$$\begin{aligned} {}_aD_t^{-2} f(t) &= \lim_{h\to 0} h \sum_{r=0}^{n} (rh) f(t-rh) = \int_0^{t-a} z f(t-z)\mathrm{d}z \\ &= \int_0^t (t-\tau) f(\tau)\mathrm{d}\tau. \end{aligned} \tag{7.15}$$

(3) 一般公式为

$${}_aD_t^{-p} f(t) = \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} h^p \sum_{r=0}^{n} \left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] f(t-rh) = \frac{1}{(p-1)!}\int_a^t (t-\tau)^{p-1} f(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{7.16}$$

利用关系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left({}_aD_t^{-p} f(t)\right) = \frac{1}{(p-2)!}\int_a^t (t-\tau)^{p-2} f(\tau)\mathrm{d}\tau = {}_a D_t^{-p+1} f(t), \tag{7.17}$$

则

$${}_aD_t^{-p} f(t) = \int_a^t \left({}_aD_t^{-p+1} f(t)\right)\mathrm{d}t. \tag{7.18}$$

从而证明了 ${}_aD_t^{-p} f(t)$ 为 $f(t)$ 的 p 重积分.

可见一个连续函数 $f(t)$ 的整数 n 阶导数和 p 重积分能用如下的统一公式来表示：

$$ {}_aD_t^p f(t) = \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} h^{-p}\sum_{r=0}^{n}(-1)^r \left(\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right) f(t-rh). \tag{7.19} $$

当 $p=m$，其表示 m 阶导数；当 $p=-m$，其表示 m 重积分.

这个事实自然导致将 (7.19) 式的整数 p 阶导数和 p 重积分推广到一个任意实数甚至复数的 p 阶导数和积分.

7.1.2 任意分数阶积分

让我们考虑 $p<0$ 的情况. 在方程 (7.19) 中，用 $-p$ 代替 $p>0$，有

$$ {}_aD_t^{-p} f(t) = \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} h^{p}\sum_{r=0}^{n} \left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] f(t-rh), \tag{7.20} $$

这里，h 和 n 的值仍有关系：$nh=t-a$.

现求 (7.20) 式的极限

$$ \begin{aligned} {}_aD_t^{-p} f(t) &= \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} h^{p}\sum_{r=0}^{n} \left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] f(t-rh) \\ &= \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} \sum_{r=0}^{n} \frac{1}{r^{p-1}}\left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] h(rh)^{p-1} f(t-rh) \\ &= \frac{1}{\Gamma(p)} \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} \sum_{r=0}^{n} \frac{\Gamma(p)}{r^{p-1}}\left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] \frac{t-a}{n}\left(r\frac{t-a}{n}\right)^{p-1} f\left(t-r\frac{t-a}{n}\right), \end{aligned} $$

令

$$ \begin{aligned} \beta_r &= \frac{\Gamma(p)}{r^{p-1}}\left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right], \\ a_{n,r} &= \frac{t-a}{n}\left(r\frac{t-a}{n}\right)^{p-1} f\left(t-r\frac{t-a}{n}\right), \end{aligned} $$

利用 Γ 函数的性质，有

$$ \lim_{r\to\infty}\beta_r = \lim_{r\to\infty}\frac{\Gamma(p)}{r^{p-1}}\left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] = 1. \tag{7.21} $$

故

$$ {}_aD_t^{-p} f(t) = \lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}} h^{p}\sum_{r=0}^{n} \left[\begin{array}{c} p \\ r \end{array}\right] f(t-rh) = \frac{1}{\Gamma(p)}\int_a^t (t-\tau)^{p-1} f(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{7.22} $$

如果导数 $f'(t)$ 在 $[a,b]$ 区间是连续的，分部积分后，可将 (7.22) 式写成如下的形式

$$
{}_aD_t^{-p}f(t)=\frac{f(a)(t-a)^p}{\Gamma(p+1)}+\frac{1}{\Gamma(p+1)}\int_a^t(t-\tau)^p f'(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{7.23}
$$

进一步，若 $f(t)$ 有 $m+1$ 阶连续导数，则

$$
{}_aD_t^{-p}f(t)=\sum_{k=0}^{m}\frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{p+k}}{\Gamma(p+k+1)}+\frac{1}{\Gamma(p+k+1)}\int_a^t(t-\tau)^{p+m}f^{(m+1)}(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{7.24}
$$

7.1.3　任意分数阶导数

现在考虑 $p>0$ 的情况，我们的目的与上述一致，去确定如下的极限.

$$
{}_aD_t^{p}f(t)=\lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}}h^{-p}\sum_{r=0}^{n}(-1)^r\begin{pmatrix}p\\ r\end{pmatrix}f(t-rh)=\lim_{\substack{h\to 0,\\ nh=t-a}}f_h^{(p)}(t), \tag{7.25}
$$

结果为

$$
{}_aD_t^{p}f(t)=\sum_{k=0}^{m}\frac{f^{(k)}(a)(t-a)^{-p+k}}{\Gamma(-p+k+1)}+\frac{1}{\Gamma(-p+k+1)}\int_a^t(t-\tau)^{-p+m}f^{(m+1)}(\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{7.26}
$$

(7.26) 式是在假设导数 $f^{(k)}$ $(k=1,2,\cdots,m+1)$ 在闭合间隔 $[a,t]$ 上连续的前提下推导出来的，这里 m 是一个整数，满足 $m>p-1$ 的条件. m 最小的可能值由以下关系确定：

$$
m<p<m+1. \tag{7.27}
$$

例 7.1　求 $(t-a)^\nu$ 的分数阶导数.

(1) 用 Grünwald-Letnikov 分数阶导数 ${}_aD_t^pf(t)$ 的定义，求如下幂函数的分数 p 阶导数

$$
f(t)=(t-a)^\nu, \tag{7.28}
$$

其中，ν 为一个实数.

利用公式

$$
{}_aD_t^{p}(t-a)^\nu=\frac{1}{\Gamma(-p)}\int_a^t(t-\tau)^{-p-1}(\tau-a)^\nu\mathrm{d}\tau, \tag{7.29}
$$

为了使积分收敛，需假设 $\nu > -1$．现令 $\tau = a + \xi(t-a)$，利用 β 函数[1]，得

$$\begin{aligned}
{}_aD_t^p(t-a)^\nu &= \frac{1}{\Gamma(-p)}(t-a)^{\nu-p}\int_0^1 \xi^\nu(1-\xi)^{-p-1}\mathrm{d}\xi \\
&= \frac{1}{\Gamma(-p)}B(-p,\nu+1)(t-a)^{\nu-p} \\
&= \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu-p+1)}(t-a)^{\nu-p} \quad (p<0,\nu>-1).
\end{aligned} \tag{7.30}$$

(2) 现在考虑 $0 \leqslant m \leqslant p < m+1$ 的情况．为了能运用 (7.26) 式，必须要求 $\nu > m$，以使得该积分收敛．我们有

$${}_aD_t^p(t-a)^\nu = \frac{1}{\Gamma(-p+m+1)}\int_a^t (t-\tau)^{m-p}\frac{\mathrm{d}^{m+1}(\tau-a)^\nu}{\mathrm{d}\tau^{m+1}}\mathrm{d}\tau, \tag{7.31}$$

这里所有非积分附加项等于零．再考虑等式

$$\frac{\mathrm{d}^{m+1}(\tau-a)^\nu}{\mathrm{d}\tau^{m+1}} = \nu(\nu-1)\cdots(\nu-m)(\tau-a)^{\nu-m-1} = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\nu-m}(\tau-a)^{\nu-m-1}, \tag{7.32}$$

并且恢复原变量 $\tau = a + \xi(t-a)$，得

$$\begin{aligned}
{}_aD_t^p(t-a)^\nu &= \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu-m)\Gamma(-p+m+1)}\int_a^t (t-\tau)^{m-p}(\tau-a)^{\nu-m-1}\mathrm{d}\tau \\
&= \frac{\Gamma(\nu+1)B(-p+m+1,\nu-m)}{\Gamma(\nu-m)\Gamma(-p+m+1)}(t-a)^{\nu-p} \\
&= \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(-p+\nu+1)}(t-a)^{\nu-p}.
\end{aligned} \tag{7.33}$$

注意 (7.33) 式与 (7.30) 式完全相同．这表明 Grünwald-Letnikov 分数阶积分表达式 (7.22) 与导数表示式 (7.26) 对幂函数的计算结果是相同的，但这两个公式的适用范围是不一样的．

从理论上来讲，若要用 Grünwald-Letnikov 分数阶导数公式，则要求所求分数 p 阶导数的函数族具有 $m+1(0 \leqslant m \leqslant p < m+1)$ 整数阶导数存在和连续的要求，能如此求导的函数是非常少的．然而，在大多问题中，人们仅知道描写物理和化学过程的函数是充分光滑的，可放心使用．

另外，与整数阶导数一样，分数阶导数仍具有如下的合成律：

$${}_aD_t^q\left({}_aD_t^pf(t)\right) = {}_aD_t^p\left({}_aD_t^qf(t)\right) = {}_aD_t^{p+q}f(t). \tag{7.34}$$

[1] β 函数定义为

$$B(z,w) = \int_0^1 \tau^{z-1}(1-\tau)^{w-1}\mathrm{d}\tau \quad (\mathrm{Re}(z)>0,\ \ \mathrm{Re}(w)>0).$$

7.1.4 黎曼–刘维尔分数阶导数

Grünwald-Letnikov 分数阶导数，是定义为一个向后差商的极限，但这种处理并不是方便的. 当然，(7.26) 式看起来较好，因为那里存在积分；可是，非积分项如何办呢? 回答这一问题是简单的，即将 (7.26) 式考虑成一个积分–微分表示式，有

$$ {}_aD_t^p f(t) = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right)^{m+1} \int_a^t (t-\tau)^{m-p} f(\tau)\mathrm{d}\tau \quad (m \leqslant p < m+1). \tag{7.35}$$

这就是最为广泛的分数阶导数的定义，被称为黎曼–刘维尔分数阶导数.

在 Grünwald-Letnikov 分数阶导数 (7.26) 式中，假设函数 $f(t)$ 必须能够 $m+1$ 次连续可微，在相同的假设下，能给出 (7.35) 式. 通过对 (7.35) 式反复完成分部积分和微分，可以证明黎曼–刘维尔分数阶导数与 Grünwald-Letnikov 分数阶导数是等价的.

讨论

(1) 黎曼–刘维尔分数阶导数定义 (7.35) 式提供了一个机会去弱化函数 $f(t)$ 的条件，也就是要求 $f(t)$ 可积; 然后积分式 (7.35) 能被微分 $m+1$ 次.

(2) 黎曼–刘维尔定义 (7.35) 式看起来也能将整数重积分和整数阶微分统一起来.

7.2 分数阶导数的性质

1. 线性律

$$ {}_aD_t^p \left(\lambda f(t) + \mu g(t)\right) = \lambda\, {}_aD_t^p f(t) + \mu\, {}_aD_t^p g(t). \tag{7.36}$$

2. 合成律

与整数阶导数一样，分数阶导数仍具有如下的合成律：

$$ {}_aD_t^q \left({}_aD_t^p f(t)\right) = {}_aD_t^p \left({}_aD_t^q f(t)\right) = {}_aD_t^{p+q} f(t). \tag{7.37}$$

3. 莱布尼茨规则

考虑两个函数 $\psi(t)$ 和 $f(t)$ 的乘积，求 $\psi(t)f(t)$ 的整数 n 阶导数的莱布尼茨规则是

$$ \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}t^n}\left(\psi(t)f(t)\right) = \sum_{k=0}^{n} \begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix} \psi^{(k)}(t) f^{(n-k)}(t). \tag{7.38}$$

现用一个实数 p 代替正整数 n，这意味着整数阶导数 $f^{(n-k)}(t)$ 将用 Grünwald-Letnikov 分数阶导数 ${}_aD_t^{p-k}f(t)$ 代替.

如果 $f(\tau)$ 在 $[a,t]$ 区间连续，$\psi(\tau)$ 在 $[a,t]$ 区间有 $n+1$ 阶连续导数，则乘积 $\psi(t)f(t)$ 的分数阶导数为

$$ {}_aD_t^p\left(\psi(t)f(t)\right)=\sum_{k=0}^{n}\begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix}\psi^{(k)}(t)\,{}_aD_t^{p-k}f(t)-R_n^p(t)\quad (p+1\leqslant n), \tag{7.39} $$

其中，

$$ R_n^p(t)=\frac{1}{n!\Gamma(-p)}\int_0^t (t-\tau)^{-p-1}f(\tau)\mathrm{d}\tau\int_\tau^t \psi^{(n+1)}(\xi)(\tau-\xi)^n\mathrm{d}\xi. \tag{7.40} $$

如果 $f(\tau)$ 和 $\psi(\tau)$ 连同它们所有的整数阶导数在 $[a,t]$ 区间连续，那么分数阶导数的莱布尼茨规则成为

$$ \frac{\mathrm{d}^p}{\mathrm{d}t^p}\left(\psi(t)f(t)\right)=\sum_{k=0}^{n}\begin{pmatrix} n \\ k \end{pmatrix}\psi^{(k)}(t)f^{(p-k)}(t). \tag{7.41} $$

莱布尼茨规则 (7.39) 式对某些函数的分数阶导数是非常有用的，例如，所求导的函数是多项式或其中一个的分数阶导数已知的函数的乘积.

4. 复合函数的分数阶导数

假设 $\phi(t)$ 是一个复合函数，写作

$$ \phi(t)=F[h(t)], \tag{7.42} $$

$\phi(t)$ 的整数 k 阶导数的公式如下

$$ \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}t^k}F(h(t))=k!\sum_{m=1}^{k}F^{(m)}[h(t)]\sum\prod_{r=1}^{k}\frac{1}{a_r!}\left(\frac{h^{(r)}(t)}{r!}\right)^{a_r}, \tag{7.43} $$

其中，后一个求和 $\sum$ 遍及所有非负整数 $a_1,a_2,\cdots,a_k$ 的组合，它们由以下两式来确定

$$ \sum_{r=1}^{k}ra_r=k,\quad \sum_{r=1}^{k}a_r=m. \tag{7.44} $$

推广到分数阶导数情况，结果为

$$ \begin{aligned} {}_aD_t^pF[h(t)]=&\frac{(t-a)^{-p}}{\Gamma(1-p)}\phi(t)\\ &+\sum_{k=1}^{\infty}\begin{pmatrix} p \\ k \end{pmatrix}\frac{k!(t-a)^{k-p}}{\Gamma(k-p+1)}\sum_{m=1}^{k}F^{(m)}[h(t)]\sum\prod_{r=1}^{k}\frac{1}{a_r!}\left[\frac{h^{(r)}(t)}{r!}\right]^{a_r}. \end{aligned} \tag{7.45} $$

5. 参数化积分的分数阶导数

对一个参数积分 (上限依赖于求导变量) 一阶导数是人们所熟知的，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^t F(t,\tau)\mathrm{d}\tau=\int_0^t \frac{\partial F(t,\tau)}{\partial t}\mathrm{d}\tau+F(t,t), \tag{7.46}$$

现推广到分数阶导数情况，结果是

$${}_0D_t^p\int_0^t F(t,\tau)\mathrm{d}\tau=\int_0^t {}_\tau D_t^p F(t,\tau)\mathrm{d}\tau+\lim_{\tau\to t}{}_\tau D_t^{p-1}F(t,\tau). \tag{7.47}$$

7.3 举　例

7.3.1 从整数阶导数到分数阶导数

一种形式上引入分数阶导数的方式来自于重复一个整数阶微分

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}x^m=\frac{m!}{(m-n)!}x^{m-n}, \tag{7.48}$$

对于一个任意指数 μ，重复以上的微分，有

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}x^\mu=\frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-n+1)}x^{\mu-n}, \tag{7.49}$$

这里伽马函数代替了阶乘. 推广到一个任意 α 阶微分，

$$\frac{\mathrm{d}^\alpha}{\mathrm{d}x^\alpha}x^\mu=\frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)}x^{\mu-\alpha}. \tag{7.50}$$

由方程 (7.50) 所定义的导数扩展就是黎曼–刘维尔导数.

更加优美和一般地引入分数阶导数的方式是用这样一个事实：n 阶导数是一个 n 重积分的逆操作，我们基于以下的积分等式：

$$\int_a^x\int_a^{y_1}\cdots\int_a^{y_{n-1}}f(y_n)\mathrm{d}y_n\cdots\mathrm{d}y_1=\frac{1}{(n-1)!}\int_a^x(x-y)^{n-1}f(y)\mathrm{d}y, \tag{7.51}$$

明显地，这个等式在 $x=a$ 时是成立的，反复地对上式两边进行求导，也不难看出这个等式也是成立的. 这一公式的推广允许定义一个任意分数 α 阶积分，即

$${}_aD_x^{-\alpha}f(x)=\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_a^x(x-y)^{\alpha-1}f(y)\mathrm{d}y\quad(x\geqslant a). \tag{7.52}$$

事实上任意级的分数阶导数是通过分数阶积分来定义的，显然它对通常的微分是成功的.

α-阶分数导数可写成

$$ {}_aD_x^{\alpha} = \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\ {}_aD_x^{\alpha-n}, \tag{7.53}$$

附加的微分的整数阶 n 等于 $[\alpha]+1$，这里 $[\alpha]$ 是 α 的整数部分. 从以上定义，我们有

$$ {}_0D_x^{\alpha}x^{\mu} = \frac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu-\alpha+1)}x^{\mu-\alpha}, \tag{7.54}$$

这正是 (7.50) 式所预想的，注意这里积分的下限为零. 一个对常数的分数阶微分的有趣结果是

$$ {}_0D_x^{\alpha}1 = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}x^{-\alpha}. \tag{7.55}$$

表明一个常数的微分仅当导数的阶数为整数时才为零，这时 $\Gamma(1-\alpha)$ 的值发散. 另外一个有趣的结果是关于指数函数的分数阶导数：

$$ {}_0D_x^{\alpha}\mathrm{e}^x = \mathrm{e}^x\frac{\gamma(-\alpha,x)}{\Gamma(-\alpha)}, \tag{7.56}$$

其中，$\gamma(-\alpha,x)$ 是不完全的 γ 函数.

7.3.2　半阶导数和积分

表 7.1 给出了几个半阶微分和积分的例子，其中 $a=0$.

表 7.1　半阶微分和积分的例子

半阶积分	函数	半阶导数
${}_0D_x^{-1/2}f(x)$	$f(x)$	${}_0D_x^{1/2}f(x)$
$2C\sqrt{x/\pi}$	C, 任意常数	$C/\sqrt{\pi x}$
$\sqrt{\pi}$	$1/\sqrt{x}$	0
$x\sqrt{\pi}/2$	$\sqrt{x}$	$\sqrt{\pi}/2$
$4x^{3/2}/3\sqrt{\pi}$	x	$2\sqrt{x/\pi}$
$\dfrac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+3/2)}x^{\mu+1/2}$	x^{μ}，$\mu>-1$	$\dfrac{\Gamma(\mu+1)}{\Gamma(\mu+1/2)}x^{\mu-1/2}$
$\exp(x)\mathrm{erf}(\sqrt{x})$	$\exp(x)$	$1/\sqrt{\pi x}+\exp(x)\mathrm{erf}(\sqrt{x})$
$\dfrac{2}{\sqrt{\pi}}\mathrm{daw}(\sqrt{x})$	$\exp(-x)$	$1/\sqrt{\pi x}-\dfrac{2}{\sqrt{\pi}}\mathrm{daw}(\sqrt{x})$
$\dfrac{x}{\pi}+\dfrac{(1+x)\arctan(\sqrt{x})}{\sqrt{\pi}}$	$\sqrt{1+x}$	$\dfrac{1}{\sqrt{\pi x}}+\dfrac{\arctan\sqrt{x}}{\sqrt{\pi}}$
$\dfrac{x}{\pi}+\dfrac{(1-x)\arctan(\sqrt{x})}{\sqrt{\pi}}$	$\sqrt{1-x}$	$\dfrac{1}{\sqrt{\pi x}}-\dfrac{\arctan\sqrt{x}}{\sqrt{\pi}}$
$\dfrac{2\mathrm{arsh}(\sqrt{x})}{\sqrt{\pi x}(1+x)}$	$\dfrac{1}{1+x}$	$\dfrac{\sqrt{1+x}-\sqrt{x}\mathrm{arsh}(\sqrt{x})}{\sqrt{\pi x}(1+x)^{3/2}}$
$\dfrac{2\arcsin(\sqrt{x})}{\sqrt{\pi x}(1-x)}$	$\dfrac{1}{1-x}$	$\dfrac{\sqrt{1-x}-\sqrt{x}\arcsin(\sqrt{x})}{\sqrt{\pi x}(1-x)^{3/2}}$

续表

半阶积分	函数	半阶导数
$2\sqrt{\pi/x}[\ln(4x)-2]$	$\ln x$	$\ln(4x)/\sqrt{\pi x}$
$\sin\left(x-\dfrac{\pi}{4}\right)-\sqrt{2}\mathrm{fres}(\sqrt{2x/\pi})$	$\sin x$	$\sin(x+\pi/4)-\sqrt{2}\mathrm{gres}(\sqrt{2x/\pi})$
$\cos\left(x-\dfrac{\pi}{4}\right)-\sqrt{2}\mathrm{gres}\left(\sqrt{\dfrac{2x}{\pi}}\right)$	$\cos x$	$\dfrac{1}{\sqrt{\pi x}}+\cos\left(x+\dfrac{\pi}{4}\right)-\sqrt{2}\mathrm{fres}\left(\sqrt{\dfrac{2x}{\pi}}\right)$

注：fres() 函数和 gres() 函数为辅助 Fresnel 积分；daw(x) 函数为 Dawson 积分函数，定义为 $\mathrm{daw}(x)=\mathrm{e}^{-x^2}\int_0^x \mathrm{e}^{t^2}\mathrm{d}t$.

在处理欠扩散问题中，人们一般用到的是分数阶时间导数，令 $a=0$，$t=0$ 为系统随时演化的初始时刻. 我们特别注意算符

$$
{}_0D_t^{1-\alpha}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}{}_0D_t^{-\alpha}, \tag{7.57}
$$

其中，$0<\alpha<1$，其将在广义扩散方程中发挥重要作用.

7.4　分数阶导数的拉普拉斯和傅里叶变换

在实际中用分数阶微积分要特别关注一个事实：在拉普拉斯变换下，算符 ${}_0D_t^{-\alpha}$ 有简单的形式

$$
L\{{}_0D_t^{-\alpha}f(t)\}=u^{-\alpha}L\{f(t)\}. \tag{7.58}
$$

对一个指数函数的分数阶微积分，其结果看起来是使人失望的，但是如果人们在方程 (7.52) 中选择积分的下限为 $a=-\infty$，将带来 Weyl 导数的结果：

$$
{}_{-\infty}D_x^{\alpha}\mathrm{e}^x=\mathrm{e}^x. \tag{7.59}
$$

此外，外尔定义与傅里叶变换积分和导数有相似的特性

$$
F\{{}_{-\infty}D_t^{\alpha}f(t)\}=(\mathrm{i}\omega)^{\alpha}f(\omega). \tag{7.60}
$$

7.4.1　拉普拉斯变换

1. 拉普拉斯变换的定义

函数 $f(t)$ 的拉普拉斯变换定义为

$$
F(s)=L\{f(t);s\}=\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-st}f(t)\mathrm{d}t, \tag{7.61}
$$

原函数 $f(t)$ 也可以从 $F(s)$ 的逆拉普拉斯变换，基于留数定理得到：

$$f(t)=L^{-1}\{F(s);s\}=\int_{c-\mathrm{i}\infty}^{c+\mathrm{i}\infty}\mathrm{e}^{st}\hat{f}(s)\mathrm{d}s, \tag{7.62}$$

其中，c 是拉普拉斯积分 (7.62) 式绝对收敛的右半平面.

用 (7.62) 式直接求逆拉普拉斯变换经常是困难的，然而，有时能给出未知原函数 $f(t)$ 行为的一些有用的信息. 例如，

(1) 两个函数 $f(t)$ 和 $g(t)$ 的卷积及其拉普拉斯变换为

$$\begin{aligned} f(t)*g(t)&=\int_0^t f(t-\tau)g(\tau)\mathrm{d}\tau=\int_0^t f(\tau)g(t-\tau)\mathrm{d}\tau;\\ L\{f(t)*g(t)\}&=\hat{f}(s)\hat{g}(s). \end{aligned} \tag{7.63}$$

(2) 函数 $f(t)$ 整数阶导数的拉普拉斯变换为

$$L\{f^{(n)};s\}=s^nF(s)-\sum_{k=0}^{n-1}s^{n-k-1}f^{(k)}(0)=s^nF(s)-\sum_{k=0}^{n-1}s^kf^{(n-k-1)}(0). \tag{7.64}$$

2. 黎曼–刘维尔分数阶微积分的拉氏变换

分数阶积分 首先考虑黎曼–刘维尔和 Grünwald-Letnikov 的 $p>0$ 序的分数阶积分，其实它是函数 $g(t)=t^{p-1}$ 和 $f(t)$ 的卷积

$${}_0D_t^{-p}f(t)=\frac{1}{\Gamma(p)}\int_0^t(t-\tau)^{p-1}f(\tau)\mathrm{d}\tau=t^{p-1}*f(t), \tag{7.65}$$

函数 t^{p-1} 的拉普拉斯变换是

$$G(s)=L\{t^{p-1};s\}=\Gamma(p)s^{-p}, \tag{7.66}$$

用卷积的拉普拉斯变换公式 (7.63)，我们获得分数阶积分的拉普拉斯变换

$$L\{{}_0D_t^{-p}f(t);s\}=s^{-p}\hat{f}(s). \tag{7.67}$$

分数阶导数 现在求黎曼–刘维尔分数阶导数的拉普拉斯变换，为此目的，我们将之写成

$${}_0D_t^pf(t)=g^{(n)}(t), \tag{7.68}$$

$$g(t)={}_0D_t^{-(n-p)}f(t)+\frac{1}{\Gamma(n-p)}\int_0^t(t-\tau)^{n-p-1}f(\tau)\mathrm{d}\tau \quad (n-1\leqslant p<n). \tag{7.69}$$

用整数阶导数的拉普拉斯变换 (7.64) 式，导致

$$L\{{}_0D_t^p f(t);s\} = s^n G(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k g^{(n-k-1)}(0). \tag{7.70}$$

函数 $g(t)$ 的拉普拉斯变换由 (7.67) 式求出

$$G(s) = s^{-(n-p)} F(s). \tag{7.71}$$

另外，从黎曼–刘维尔分数阶导数的定义知

$$g^{(n-k-1)}(t) = \frac{\mathrm{d}^{n-k-1}}{\mathrm{d}t^{n-k-1}}\ {}_0D_t^{-(n-p)} f(t) =\ {}_0D_t^{p-k-1} f(t). \tag{7.72}$$

将 (7.71) 式和 (7.72) 式代入 (7.70) 式，我们获得黎曼–刘维尔分数阶 $p>0$ 导数的拉普拉斯变换：

$$L\{{}_0D_t^p f(t);s\} = s^p F(s) - \sum_{k=0}^{n-1} s^k \left[{}_0D_t^{p-k-1} f(t)\right]_{t=0} \quad (n-1 \leqslant p < n). \tag{7.73}$$

3. Grünwald-Letnikov 分数阶导数的拉氏变换

让我们考虑 $0 \leqslant p < 1$ 的情况：

$${}_0D_t^p f(t) = \frac{f(0)t^{-p}}{\Gamma(1-p)} + \frac{1}{\Gamma(1-p)} \int_0^t (t-\tau)^{-p} f'(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{7.74}$$

利用幂函数、卷积以及整数导数的拉普拉斯变换，有

$$L\{{}_0D_t^p f(t);s\} = \frac{f(0)}{s^{1-p}} + \frac{1}{s^{1-p}}\left[s\hat{f}(s) - f(0)\right] = s^p \hat{f}(s). \tag{7.75}$$

7.4.2　傅里叶变换

1. 傅里叶变换的定义

一个取值范围为 $(-\infty,\infty)$ 的连续函数 $h(t)$ 的傅里叶变换和逆变换定义为

$$\tilde{h}(\omega) = F\{h(t);\omega\} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} h(t)\mathrm{d}t; \quad h(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{h}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega, \tag{7.76}$$

卷积及其傅里叶变换是

$$\begin{aligned} h(t)*f(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} h(t-\tau)g(\tau)\mathrm{d}\tau = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)g(t-\tau)\mathrm{d}\tau, \\ F\{h(t)*g(t);\omega\} &= \tilde{h}(\omega)\tilde{g}(\omega). \end{aligned} \tag{7.77}$$

傅里叶变换是一个关于线性动力学系统的频率域分析的非常有用的工具.

2. 分数阶积分的傅里叶变换

首先求出具有下限 $a=-\infty$ 的黎曼–刘维尔分数阶积分的傅里叶变换，即

$$ {}_{-\infty}D_t^{-\alpha}g(t)=\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_{-\infty}^{t}(t-\tau)^{\alpha-1}g(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{7.78}$$

这里，$0<\alpha<1$.

从如下函数的拉普拉斯变换出发

$$ h(t)=\begin{cases}\dfrac{t^{\alpha-1}}{\Gamma(\alpha)}, & t>0;\\ 0, & t\leqslant 0\end{cases} \tag{7.79}$$

那么

$$ \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_0^{\infty}t^{\alpha-1}\mathrm{e}^{-st}\mathrm{d}t=s^{-\alpha}. \tag{7.80}$$

令 $s=-\mathrm{i}\omega$，这里 ω 是实的，当 $0<\alpha<1$，可以直接得到这个函数的傅里叶变换

$$ F\{h(t);\omega\}=(-\mathrm{i}\omega)^{-\alpha}. \tag{7.81}$$

我们发现黎曼–刘维尔分数阶积分 (7.77) 的傅里叶变换能写成函数 $h(t)$ 和 $g(t)$ 的卷积的形式：

$$ {}_{-\infty}D_t^{\alpha}f(t)=h(t)*g(t), \tag{7.82}$$

利用 (7.77) 式，就有

$$ F\{{}_{-\infty}D_t^{-\alpha}g(t);\omega\}=(\mathrm{i}\omega)^{-\alpha}G(\omega), \tag{7.83}$$

这里 $G(\omega)$ 是函数 $g(t)$ 的傅里叶变换.

3. 分数阶导数的傅里叶变换

考虑如下的分数阶导数的定义式：

$$ {}_{-\infty}D_t^{\alpha}g(t)=\frac{1}{\Gamma(n-\alpha)}\int_{-\infty}^{t}\frac{g^{(n)}(\tau)}{(t-\tau)^{\alpha+1-n}}\mathrm{d}\tau={}_{-\infty}D_t^{\alpha-n}g^{(n)}(t), \tag{7.84}$$

这里，$n-1<\alpha<n$.

利用黎曼–刘维分数阶积分和一个整数阶导数的傅里叶变换，则上式的傅里叶变换是

$$ \begin{aligned}F\{D^{\alpha}g(t);\omega\}&=(-\mathrm{i}\omega)^{\alpha-n}F\{g^{(n)}(t);\omega\}\\&=(-\mathrm{i}\omega)^{\alpha-n}(-\mathrm{i}\omega)^{n}G(\omega)\\&=(-\mathrm{i}\omega)^{\alpha}G(\omega),\end{aligned} \tag{7.85}$$

这里，符号 D^{α} 代表分数阶导数 ${}_{-\infty}D_t^{\alpha}$.

7.5　分数阶常微分和偏微分方程的解析解

7.5.1　线性分数阶常微分方程

本节我们用分数阶导数的拉普拉斯变换的著名公式

$$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-pt} {}_0D_t^{\alpha} f(t)\mathrm{d}t = p^{\alpha}F(p) - \sum_{k=0}^{n-1} p^k {}_0D_t^{\alpha-k-a} f(t)\Big|_{t=0} \quad (n-1<\alpha\leqslant n). \tag{7.86}$$

例 7.2　求解下列方程：

$${}_0D_t^{1/2} f(t) + af(t) = 0 \quad (t>0); \quad {}_0D_t^{-1/2} f(t)\Big|_{t=0} = C. \tag{7.87}$$

解：对方程 (7.87) 两边运用拉普拉斯变换，得到

$$F(s) = \frac{C}{s^{1/2}+a}, \quad C = {}_0D_t^{-1/2} f(t)\Big|_{t=0}, \tag{7.88}$$

再用逆拉普拉斯变换，则给出解

$$f(t) = Ct^{-1/2}E_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(-a\sqrt{t}). \tag{7.89}$$

例 7.3　求解下列方程：

$${}_0D_t^{Q} f(t) + {}_0D_t^{q} f(t) = h(t). \tag{7.90}$$

解：假设 $0<q<Q<1$，对这一方程进行拉普拉斯变换，有

$$\begin{gathered} (s^Q + s^q)F(s) = C + H(s), \\ C = \left[{}_0D_t^{q-1} f(t) + {}_0D_t^{Q-1} f(t) \right]_{t=0}, \end{gathered} \tag{7.91}$$

所以

$$F(s) = [C + H(s)]\,\frac{s^{-q}}{s^{Q-q}+1}. \tag{7.92}$$

经过逆变换，得到解

$$f(t) = DG(t) + \int_0^t G(t-\tau)h(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{7.93}$$

其中，

$$G(t) = t^{Q-1}E_{Q-q,Q}(-t^{Q-q}).$$

例 7.4 在非零初始条件下，非均匀分数阶微分方程的初始值问题.

$${}_0D_t^{\alpha}y(t)-\lambda y(t)=h(t)\quad(t>0);\quad {}_0D_t^{\alpha-k}y(t)\big|_{t=0}=b_k\quad(k=1,2,\cdots,n).\quad(7.94)$$

式中，$n-1<\alpha<n$.

解：我们用拉普拉斯变换技术以及如下的公式

$$\int_0^t \mathrm{e}^{-pt}t^{\alpha k+\beta-1}E_{\alpha,\beta}^{(k)}(\pm at^{\alpha})\mathrm{d}t=\frac{k!p^{\alpha-\beta}}{(p^{\alpha}\mp a)^{k+1}}\quad[\mathrm{Re}(p)>|a|^{1/\alpha}],$$

就可以直接获得以上方程的解.

事实上，考虑初始条件 (7.94) 式，这一方程的拉普拉斯变换为

$$p^{\alpha}Y(p)-\lambda Y(p)=H(p)+\sum_{k=1}^{n}b_kp^{k-1},$$

$$Y(p)=\frac{H(p)}{p^{\alpha}-\lambda}+\sum_{k=1}^{n}b_k\frac{p^{k-1}}{p^{\alpha}-\lambda},\quad(7.95)$$

然后，利用如下公式

$$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-pt}t^{\alpha k+\beta-1}E_{\alpha,\beta}^{(k)}(\pm at^{\alpha})\mathrm{d}t=\frac{k!p^{\alpha-\beta}}{(p^{\alpha}\mp a)^{k+1}}\quad[\mathrm{Re}(p)>|a|^{1/\alpha}],\quad(7.96)$$

对方程 (7.95) 实施逆拉普拉斯变换，则给出方程 (7.94) 的解析解：

$$y(t)=\sum_{k=1}^{n}b_kt^{\alpha-k}E_{\alpha,\alpha-k+1}(\lambda t^{\alpha})+\int_0^t(t-\tau)^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}[\lambda(t-\tau)^{\alpha}]h(\tau)\mathrm{d}\tau.\quad(7.97)$$

7.5.2 线性分数阶偏微分方程

拉普拉斯变换方法也能用来求解分数阶线性偏微分方程.

例 7.5 分数阶扩散方程，初始边界值问题：

$${}_0D_t^{\alpha}u(x,t)=\lambda^2\frac{\partial^2u(x,t)}{\partial x^2}\quad(t>0,\quad -\infty<x<\infty);$$

$$\lim_{x\to\pm\infty}u(x,t)=0;\quad {}_0D_t^{\alpha-1}\ u(x,t)|_{t=0}=\psi(x).\quad(7.98)$$

假设 $0<\alpha<1$.

解：现基于两参数 Mittag-Leffler 函数，我们给出以上方程的解析解. 考虑边界条件 (7.98) 式，对 x 变量进行傅里叶变换，有

$${}_0D_t^{\alpha}\bar{u}(\beta,t)+\lambda^2\beta^2\bar{u}(\beta,t)\ =\ 0,\quad(7.99)$$

$${}_0D_t^{\alpha-1}\bar{u}(\beta,t)\big|_{t=0}\ =\ \bar{\psi}(\beta),\quad(7.100)$$

式中，β 是傅里叶变化参数，对方程 (7.99) 应用拉普拉斯变换并利用初始条件 (7.100) 式，我们获得

$$\bar{u}(\beta,p)=\frac{\psi(\beta)}{p^{\alpha}+\lambda^2\beta^2}. \tag{7.101}$$

对方程 (7.101) 实施逆拉普拉斯变换，并利用条件 (7.96) 式，得出

$$u(\beta,t)=\psi(\beta)t^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}(-\lambda^2\beta^2t^{\alpha}), \tag{7.102}$$

然后，实施逆傅里叶变换，故方程 (7.98) 的解为

$$u(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}G(x,\xi,t)\psi(\xi)\mathrm{d}\xi, \tag{7.103}$$

$$G(x,t)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}t^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}(-\lambda^2\beta^2t^{\alpha})\cos(\beta x)\mathrm{d}\beta. \tag{7.104}$$

让我们求出 (7.104) 式的积分，该式的拉普拉斯变换为

$$g(x,p)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\cos(\beta x)}{\lambda^2\beta^2+p^{\alpha}}\mathrm{d}\beta=\frac{1}{2\lambda}p^{-\alpha/2}\mathrm{e}^{-|x|\lambda^{-1}p^{\alpha/2}}, \tag{7.105}$$

而逆拉普拉斯变换给出

$$G(x,t)=\frac{1}{4\lambda\pi\mathrm{i}}\int_{\mathrm{Br}}\mathrm{e}^{pt}p^{-\frac{\alpha}{2}}\exp(-|x|\lambda^{-1}p^{\alpha/2})\mathrm{d}p, \tag{7.106}$$

令 $\sigma=pt$，$z=|x|\lambda^{-1}t^{-\rho}$ $(\rho=\alpha/2)$，并且将 Bromwich 环线变为 Hankel 环线 Ha，我们获得

$$G(x,t)=\frac{t^{1-\rho}}{2\lambda}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\mathrm{Ha}}\frac{\mathrm{e}^{\sigma-z\sigma^{\rho}}}{\sigma^{\rho}}\mathrm{d}\sigma=\frac{1}{2\lambda}t^{\rho-1}W(-z,-\rho,\rho)\quad\left(z=\frac{|x|}{\lambda t^{\rho}}\right). \tag{7.107}$$

其中，$W(z,\lambda,\mu)$ 是 Wright 函数. 其实，我们刚才完成了 $u_1(\beta)=t^{\alpha-1}E_{\alpha,\alpha}(-\lambda^2\beta^2t^{\alpha})$ 的傅里叶余弦变换.

容易验证，若 $\alpha=1$，分数阶格林函数退化为高斯函数：

$$G(x,t)=\frac{1}{2\lambda\sqrt{\pi t}}\exp\left(-\frac{x^2}{4\lambda^2t}\right). \tag{7.108}$$

例 7.6　分数阶扩散方程：初始值问题

$${}_0D_t^{\alpha}u(x,t)=\lambda^2\frac{\partial^2u(x,t)}{\partial x^2}\quad(t>0,\quad -\infty<x<\infty); \tag{7.109}$$

$$\lim_{x\to\pm\infty}u(x,t)=0;\quad u(x,0)=f(x). \tag{7.110}$$

假设 $0 < \alpha < 1$.

解：对方程 (7.109) 进行拉普拉斯变换，有

$$L\{{}_0D_t^\alpha y(t); p\} = p^\alpha Y(p) - p^{\alpha-1}y(0), \tag{7.111}$$

得出

$$p^\alpha \bar{u}(x,p) - p^{\alpha-1}f(x) = \lambda^2 \frac{\partial^2 \bar{u}(x,p)}{\partial x^2} \quad (|x| < \infty); \lim_{x\to\pm\infty} \bar{u}(x,p) = 0 \quad (t > 0) \tag{7.112}$$

现在对方程 (7.112) 进行傅里叶指数变换并代入初始条件 (7.112) 式，我们获得

$$U(\beta, p) = \frac{p^{\alpha-1}}{p^\alpha + \lambda^2\beta^2}, \tag{7.113}$$

式中，$U(\beta, p)$ 是 $\bar{u}(x,p)$ 的傅里叶变换.

分式 $\dfrac{p^{\alpha-1}}{p^\alpha + \lambda^2\beta^2}$ 的逆拉普拉斯变换是 $E_{\alpha,1}(-\lambda^2\beta^2t^\alpha)$，所以，方程 (7.113) 的逆拉普拉斯和逆傅里叶变换就是原方程的解

$$u(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x-\xi, t) f(\xi) \mathrm{d}\xi, \tag{7.114}$$

$$G(x,t) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty E_{\alpha,1}(-\lambda^2\beta^2t^\alpha)\cos(\beta x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2\lambda} t^{-\rho} W(-z, -\rho, 1-\rho), \tag{7.115}$$

式中, $W(z, \lambda, u)$ 是 Wright 函数.

显然，对于 $t \to 0$ 和 $t \to \infty$，以上两个问题的渐进行为是不同的，当然这是由于不同的初始条件所引起的，解取决于初始条件的数目和类型.

7.6　分数阶微积分的应用

现举几个实例说明分数阶统计与力学的研究范畴.

7.6.1　分数阶力学

经典力学仅处理保守系统，而几乎所有的物理世界的经典过程都是非保守的，存在不可逆耗散效应. 一个希望包含耗散的动机是推广牛顿第二定律. 如果 F 是一个作用在物体上的外力，x 是物体的位移，我们知道：① 弹性模型 $(F = kx)$；② 流体中的牛顿模型 $[F = k\dot{x}(t)]$；③ 牛顿第二定律 $[F = k\ddot{x}(t)]$. 这些能被考虑成以下方程的特殊情况：

$$F = k\frac{\mathrm{d}^\alpha}{\mathrm{d}t^\alpha}x(t), \tag{7.116}$$

其中，α 是一个介于 0 和 2 之间的任意实数. 这个方程就是牛顿第二定律的推广.

1. 分数阶白噪声

定义白噪声 $\xi(t)$ 的分数阶积分：

$$x(t)-x(0)={}_0D_t^{\alpha}\xi(t)=\frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_0^t\frac{\xi(t')}{(t-t')^{1-\alpha}}\mathrm{d}t', \tag{7.117}$$

白噪声的分数阶积分叫做分数阶噪声. 这个噪声是高斯的，但是不稳定，它的关联函数为

$$\begin{aligned}&\langle x(t_1)x(t_2)\rangle=\frac{t_>^{\alpha-1}t_<^{\alpha}}{\alpha\Gamma^2(\alpha)}\,{}_2F_1(1,1-\alpha;1+\alpha;t_</t_>),\\&t_<=\min(t_1,t_2),\quad t_>=\max(t_1,t_2),\\&\langle x^2(t)\rangle\propto t^{2\alpha-1}.\end{aligned} \tag{7.118}$$

实际上，这个噪声能做成稳定的，仅把方程 (7.117) 的积分下限 0 换成 $-\infty$ 即可. 不过在这种情况下，人们需要对幂律核作一点修正，以保证积分的收敛.

分数阶布朗运动不仅在数学和随机过程理论方面用途奇特，同时也有着广泛的物理应用. 它能被用来描写聚合物链、破缺半导体中的电子输运、梳状结构中的扩散等. 在许多情况下，描写粒子的布朗扩散的最为简便的方式并不是维纳过程，而是 Ornstein-Uhlenbeck 过程或朗之万方法，也就是以下随机微分方程的解：

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=-\gamma v+\xi(t), \tag{7.119}$$

式中，v 是布朗粒子的速度，γ 是液体摩擦强度，$\xi(t)$ 是周围介质提供给布朗粒子的随机力. 一个粒子的位移不能由它的轨迹来确定，而是通过对瞬间速度的积分来获得. 除了布朗运动问题本身，这个方法被广泛地用来描写外部噪声驱动的系统. 这就带来一个问题：朗之万方程是否也能描写反常扩散？如果可以，那么对应的随机源将是什么样的结构？

原则上，如果知道了福克乐-普朗克方程，那么朗之万方程就能够从它导出. 然而，这种方法具有一定的难度，即使得到了也会很复杂，这是因为分数阶微积分算符的复杂结构. 所以，下面我们考虑三种形式的朗之万方程，它们的共同之处是基于分数阶导数而不是媒体的性质来引入记忆.

2. 含有分数阶导数的朗之万方程

1) 方式一

在福克乐-普朗克方程中引入分数阶微分算符，能正确地描写反常输运过程. 让我们考虑不同于通常形式的朗之万方程，关于时间的一次导数用分数阶 ν 导数来代替

$$\frac{\mathrm{d}^{\nu}}{\mathrm{d}t^{\nu}}v=-\gamma v+F(t), \tag{7.120}$$

现用分数阶积分算符作用到方程的两边，得到

$$v(t) - v(0) = {}_0I_t^{\nu}[-\gamma v + F(t)]. \tag{7.121}$$

将分数阶积分表示成显式，我们重写成下列形式：

$$v(t) = v(0) + A(t) - \frac{\gamma}{\Gamma(\nu)}\int_0^t \frac{v(t')}{(t-t')^{1-\nu}}\mathrm{d}t', \quad A(t) = \frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^t \frac{F(t')}{(t-t')^{1-\nu}}\mathrm{d}t', \tag{7.122}$$

这个方程解的形式为

$$v(t) = v(0)E_{1,\nu}(-\gamma t^{\nu}) + \int_0^t \frac{F(t')}{(t-t')^{1-\nu}}E_{\nu,\nu}[-\gamma(t-t')^{\nu}]\mathrm{d}t', \tag{7.123}$$

这里，$E_{\alpha,\beta}(z)$ 是著名的 Mittag-Leffleur 函数：

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{z^k}{\Gamma(\alpha+\beta k)}. \tag{7.124}$$

若 $\nu = 1$，则方程 (7.123) 退化到通常朗之万方程的解：

$$v(t) = v(0)\mathrm{e}^{-\gamma t} + \int_0^t F(t')\mathrm{e}^{-\gamma(t-t')}\mathrm{d}t'. \tag{7.125}$$

若 $F(t)$ 被考虑成一个平均值等于零的高斯 δ 关联噪声源，则速度关联函数为

$$\begin{aligned}\langle v(t_1)v(t_2)\rangle = &v^2(0)E_{1,\nu}(-\gamma t_1^{\nu})E_{1,\nu}(-\gamma t_2^{\nu})\\ &+q\int_0^{\min(t_1,t_2)}\mathrm{d}t'\frac{E_{\nu,\nu}[-\gamma(t_1-t')^{\nu}]}{(t_1-t')^{1-\nu}}\frac{E_{\nu,\nu}[-\gamma(t_2-t')^{\nu}]}{(t_2-t')^{1-\nu}}.\end{aligned} \tag{7.126}$$

如果我们像方程 (7.118) 那样引入 $t_>$ 和 $t_<$，那么方程 (7.126) 右边的积分就能写成一个显式，这并不是方便的. 不过，我们能获得几个重要的结果而不必去直接计算积分. 基本的特性是积分是一个关于 t_1 和 t_2 对称的函数. 进一步，让我们发现粒子的方均位移，出发点是如下的公式：

$$\langle[x(t)-x(0)]^2\rangle = \int_0^t\int_0^t\langle v(t_1)v(t_2)\rangle\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2, \tag{7.127}$$

将 (7.126) 式代入上式，有

$$\langle[x(t)-x(0)]^2\rangle = v^2(0)[tE_{2,\nu}(-\gamma t^{\nu})]^2 + \frac{q}{\gamma^2}\left\{t - 2tE_{2,\nu}(-\gamma t^{\nu}) + \int_0^t E_{1,\nu}^2(-\gamma t^{\nu})\mathrm{d}t\right\}, \tag{7.128}$$

在长时间极限下，$E_{1,\nu}(-\gamma t^\nu) \propto E_{2,\nu}(-\gamma t^\nu) \propto 1/(\gamma t^\nu)$， 以上的积分当 $t \to \infty$ 需收敛，这要求 $\nu > \dfrac{1}{2}$，从而导致结果：

$$\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle = \frac{q}{\gamma^2} t. \tag{7.129}$$

这与正常朗之万方程的结果一样. 即使 $\nu < \dfrac{1}{2}$，积分发散，但随时间增长的线性项在该式中也是最高阶的. 故该推广方式并不产生反常扩散.

2) 方式二

首先，注意到在方程 (7.127) 中，我们像通常那样将粒子速度定义为坐标的一阶时间导数，即 $x(t) = \displaystyle\int_0^t v(t')\mathrm{d}t'$. 其实，直觉上让我们考虑一个更一般的关系：

$$x(t) = {}_0I_t^\nu v(t) = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t \frac{v(t')}{(t-t')^{1-\nu}} \mathrm{d}t', \tag{7.130}$$

这是用分数阶积分对系统记忆最完整的可能描写，那么坐标相对于时间的分数阶导数就可作为粒子速度的定义式. 为了解释这种速度的物理意义，让我们考察一个扩散粒子的微观运动，其描绘出一条处处不可微的挠曲线. 对于如此曲线，人们经常能发现一个分数阶导数，也就是一个幂权重对轨道求平均的导数，那么所观察到的粒子运动是平均运动. 按照记忆的思想，对于分形路径 (这正是经典布朗粒子的轨迹) 而言，某些瞬间速度和位移并不贡献给最终的宏观运动. 一旦这种情况发生，解的行为就发生变化，扩散成为反常. 故此情况下，有

$$\begin{aligned}\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle =& \ {}_0I_{t_1}^\nu \ {}_0I_{t_2}^\nu \langle v(t_1)v(t_2) \rangle \\ =& \frac{v^2(0)}{\gamma^2}[E_{1,\nu}(-\gamma t^\nu) - 1]^2 \\ &+ \frac{2qt^{2\nu-1}}{\gamma^2} \sum_{k,l=1}^{\infty} \frac{(-\gamma)^{k+l}}{\Gamma(\nu+\nu k)\Gamma(\nu l)} \frac{\Gamma(\nu k + \nu l + \nu - 1)}{\Gamma(\nu k + \nu l + 2\nu)} t^{\nu k + \nu l},\end{aligned} \tag{7.131}$$

在长时间极限下，第一项趋于 $v^2(0)/\gamma^2$，第二项的级数收敛，所以我们有

$$\langle [x(t) - x(0)]^2 \rangle \propto N \frac{q}{\gamma^2} t^{2\nu-1}, \quad 1 < N < \frac{2}{\Gamma(\nu)}. \tag{7.132}$$

这与分数阶扩散方程和分数阶布朗运动的渐进结果一致. ν 值越大粒子扩散越快，因子 N 的精确计算见本章附录 B.

3) 方式三

我们现在分开探讨记忆和分数阶行为对作用在粒子上力的规则和随机部分的影响. 通过仅在朗之万方程中考虑无规力的记忆就能说明两者给出相同的分数阶

渐进行为，这有更清楚的物理意义，方程 (7.122) 可写为

$$v(t) = v(0) - \gamma \int_0^t v(t')\mathrm{d}t' + \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^t \frac{F(t')}{(t-t')^{\nu}}\mathrm{d}t', \tag{7.133}$$

事实上，这意味着在方程 (7.119) 中无规力不是 δ 关联的，而是 δ 关联过程 $g(t)$ 的分数阶导数，

$$F(t) = {}_0D_t^{1-\nu} g(t), \quad \langle g(t_1)g(t_2)\rangle = q\delta(t_1 - t_2). \tag{7.134}$$

也就是说，朗之万方程中的高斯白噪声被分数阶噪声所替代. 方程 (7.133) 仍然能被解析求解，即

$$v(t) = v(0)\mathrm{e}^{-\gamma t} + \int_0^t \frac{F(t')}{(t-t')^{1-\nu}} E_{1,\nu}[-\gamma(t-t')]\mathrm{d}t', \tag{7.135}$$

关联函数为

$$\langle v(t_1)v(t_2)\rangle = v^2(0)\mathrm{e}^{-\gamma(t_1+t_2)} + q\int_0^{\min(t_1,t_2)} \mathrm{d}t' \frac{E_{1,\nu}[-\gamma(t_1-t')]}{(t_1-t')^{1-\nu}} \frac{E_{1,\nu}[-\gamma(t_2-t')]}{(t_2-t')^{1-\nu}}, \tag{7.136}$$

粒子方均位移的计算与本章附录 B 是相似的，结果为

$$\begin{aligned} \langle [x(t)-x(0)]^2\rangle &= v^2(0)\frac{(1-\mathrm{e}^{-\gamma t})^2}{\gamma^2} + \frac{q}{\gamma^2}S, \\ S &= 2\sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{(-\gamma)^{k+l}}{\Gamma(1+\nu+k)\Gamma(\nu+l)} \frac{t^{k+l+2\nu+1}}{(k+l+2\nu)\Gamma(k+l+2\nu+l)}. \end{aligned} \tag{7.137}$$

对 S 微分两次，有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}S = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[t^{\nu}E_{1+\nu,\nu}(-\gamma t) - 1\right]^2, \tag{7.138}$$

由此可见，当 $t \to \infty$，第二项确定了方均位移的渐进行为

$$\langle [x(t)-x(0)]^2\rangle \propto \frac{1}{(2\nu-1)\Gamma^2(\nu+1)} \frac{q}{\gamma^2} t^{2\nu-1}, \tag{7.139}$$

除了常量因子以外，这符合方程 (7.132) 的结果.

4) 方式四

仅对摩擦力考虑记忆功能，则关于速度变量的方程为

$$v(t) = v(0) - \frac{\gamma}{\Gamma(\nu)} \int_0^t \frac{v(t')}{(t-t')^{\nu}}\mathrm{d}t' + \int_0^t F(t')\mathrm{d}t', \tag{7.140}$$

式中, $F(t)$ 还是高斯白噪声. 这意味着摩擦力正比于速度的分数阶导数: $f_{\text{diss}} = -\gamma\ {}_0D_t^{1-\nu}v(t)$. 以上方程的解是

$$v(t) = v(0)E_{1,\nu}(-\gamma t^{\nu}) + \int_0^t F(t')E_{\nu,\nu}[-\gamma(t-t')^{\nu}]\mathrm{d}t', \tag{7.141}$$

第二项贡献到粒子的方均位移的结果导致如下的形式

$$\langle [x(t)-x(0)]^2\rangle \propto M\frac{q}{\gamma^2}t^{3-2\nu}, \quad 1 < M < \frac{1}{\Gamma(1+\nu)}. \tag{7.142}$$

值得注意的是，不像以前两种情况，这里对 ν 的取值没有限制，粒子的扩散行为只是依赖于它是大于还是小于 1，或者说，欠扩散的时间幂指数小于 1，超扩散的时间幂指数大于 1. 例如，波在非线性或随机介质中的传播. ν 的值越大，则粒子移动的就越慢，这是因为 $\nu > 1$ 所对应的摩擦力不再是速度的一个分数阶导数， 而是一个分数阶积分，所以它的影响增加. 当 $\nu > \dfrac{3}{2}$，方均位移随着时间的增长而趋于零. 这对应于粒子运动的停止，因为在方程 (7.142) 中被忽略的项，要么消失要么为常量. 另外，$\dfrac{1}{2} < \nu < 1$ 的限制被用在以前情况，仅是简单地估计了一下求和的收敛情况. 一般来讲，这并不影响主要结果，而能给出超扩散和欠扩散结果. 由于以前的历史仅影响摩擦力，那么增加 ν 的值，扩散将被抑制.

讨论

(1) 若将朗之万方程中的一阶导数替代为分数阶，而还用通常的速度和坐标的关系，则解仍然给出线性渐进行为. 这意味着同时考虑摩擦力和无规力的记忆效应，不影响粒子的长时间运动行为，而只是影响开始阶段. 这是合理的，因为无规源提供给粒子一个附加的能量，而摩擦导致它被耗散. 长时间后，当系统达到稳定态，这两种效应互相竞争，但它们具有相同的持续时间.

(2) 使用了方程 (7.130)，就意味着在保持牛顿第二定律下，粒子的运动方程写作

$$\frac{\mathrm{d}^{2\nu}x}{\mathrm{d}t^{2\nu}} = \frac{\mathrm{d}^{\nu}x}{\mathrm{d}t^{\nu}} + F(t), \tag{7.143}$$

这是一个最一般性包含记忆的模型. 那么，扩散的反常行为就来源于速度的分数阶积分，或者说，瞬间速度仅部分地贡献到最终的轨迹之中.

(3) 反常扩散还是朗之万方程含有一个白噪声分数阶导数源的结果. 如此噪声的自关联函数就是方程 (7.118)，具有一个幂律行为. 注意到通过用负无穷下限的刘维尔分数阶导数可获得一个稳定噪声，不过当直接用方程 (7.122)、(7.133) 和 (7.140) 时，由于幂律积分，那些导数可能导致发散. 此外，这不是十分有道理的，因为在真实的情况下，当运动开始后，总存在一个矩. 然而，分数阶布朗运动不能

划归为此类过程，它的记忆被一个幂律函数所描写，导致长程关联而没有它们自己的时间尺度. 不过，噪声的非稳定并不带来一个错误的理解. 下面我们将说明此过程仅在一个宽泛意义下能被当成稳定的，因为传播概率唯一地依靠小的传播时间 Δt，即 $\Delta t \ll t$.

(4) 缺乏稳定性是反常扩散中的一个重要和十分明显的特性. 通常布朗运动可以用两个不同的随机过程来描写. Ornstein-Uhlenbeck 过程是严格稳定的，但没有独立增量. 此外，它的增量也不是无关联的. 维纳过程是在强摩擦和噪声极限下的积分 OU 过程，具有稳定的独立增量，但是既不具有严格意义的稳定性，也不具有宽泛的稳定性. 以上所讨论的过程含有一个白噪声分数阶导数的源，这看起来是一个中间过程，它没有稳定增量，但在一个宽泛意义下有渐进稳定性. 运动的分形结构导致一个事实：这种稳定性仅在一个短的时间期限内观察到，即过程成为准稳定性. 总之，如果以前历史效应仅通过耗散力作用在粒子身上，那么它的行为是反常的.

时间尺度

需要一个分数阶时间导数出现在方程之中而去描述系统，均是对早先的事件有记忆；建立在分数阶导数基础上的方程描写了反常慢扩散，系统具有一个宽的弛豫时间分布. 用黏滞行为的分数阶模型可以被解释为引入了“不同物质具有分离的时间尺度”的假设.

7.6.2 分数阶微积分的物理解释

整数阶微积分有着明确的物理意义，例如，坐标的一阶导数是粒子的瞬时速度；速度的积分表示粒子的位移. 然而，对于分数阶微积分运算，目前还没有一个满意的统一物理解释. 这里介绍捷克斯洛伐克的 Igor Podlubny 的一种观点 (Podlubny, 1999).

首先引入两个不同的时间概念：个人时间 τ 和宇宙时间 T. 宇宙时间是均匀的、等间隔流逝的时间，也叫绝对时间，记为 T；个人时间是非均匀的时间. 两种时间的表示如图 7.1 所示.

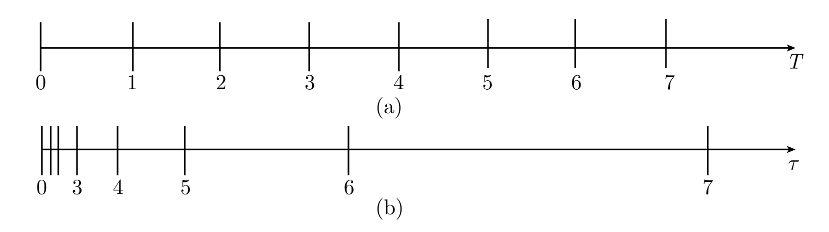


图 7.1 宇宙时间 (a) 和个人时间 (b) 的示意图

如果有一个观测者 A 对一运动物体进行观测，他使用一个时钟计时，但这个

时钟越走越慢，每个时间间隔都比上一个时间间隔要长，那么观测者 A 拥有一个自己并不知道的错误时间 τ. 另一个观测者同样对该运动物体进行观测，他使用的时间是宇宙时间 T，每个时间间隔都是均匀的. 两个时间转换关系为 $T=g(\tau)$.

设观测者 A (拥有个人时间 τ) 对运动物体测出的速度为 $u(\tau)$，那么他测出该运动物体运行的距离为

$$S_A(t)=\int_0^t u(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{7.144}$$

对于同一个运动物体，观测者 B (拥有宇宙时间) 测出的该物体运动的距离等于

$$S_B(t)=\int_0^t u(\tau)\mathrm{d}g(\tau). \tag{7.145}$$

实际上，该物体运动的距离应该是观测者 B 测量出来的距离，即 $S_B(t)$.

考虑分数阶微积分运算的黎曼–刘维尔积分定义

$$ {}_0I_t^{\nu}f(t)=\frac{1}{\Gamma(\nu)}\int_0^t\frac{f(\tau)}{(t-\tau)^{1-\nu}}\mathrm{d}\tau=\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}g(\tau), \tag{7.146}$$

$$g(\tau)=\frac{1}{\Gamma(1+\nu)}[t^{\nu}-(t-\tau)^{\nu}]. \tag{7.147}$$

若将函数 $f(\tau)$ 看成物体运动的速度 $u(\tau)$，绝对时间 T 与个人时间 τ 满足关系 $T=g(\tau)$，如 (7.147) 式所示，则黎曼–刘维尔定义下的分数阶积分运算的物理意义为：在个人时间 τ 测度上，所观测的运动物体以速度 $f(\tau)$ 实际走过的距离 $S_B(t)$，记作 ${}_0I_t^{\nu}f(t)=S_B(t)$.

类似地，用黎曼–刘维尔分数阶微积分的定义，可以理解分数阶导数的物理意义. 根据运动物体的速度是该物体运动距离的一阶导数的关系，可得

$$u_B(t)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S_B=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,{}_0I_t^{\nu}f(t)={}_0D_t^{1-\nu}f(t), \tag{7.148}$$

也就是说，观测者 B 测量到物体的速度为函数 $f(t)$ 的 $1-\nu$ 阶黎曼–刘维尔微分.

自相似系统

分数阶导数经常出现在自相似、分级组织系统. 考虑一个 Lord Kelvin 提出的有关电报传输电缆的离散模型，这个模型包含了相同的电阻和电容，以图 7.2 的方式连接在一起. 左端有一个电压信号，它的右端是通过阻抗 Z 而响应. 基于瞬时欧姆定律的傅里叶变换，阻抗 Z、电流 I 和电压 V 之间的关系简单地表示为

$$Z(\omega)I(\omega)=V(\omega), \tag{7.149}$$

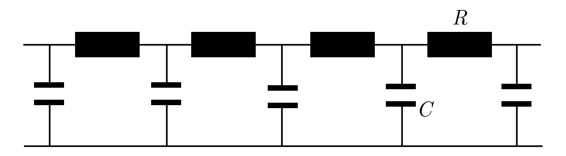


图 7.2 电报传输电缆离散模型

式中，$Z(\omega)$ 的计算是电子线路中的一个标准问题，其表达式写作

$$Z(\omega)=R+\frac{1}{\mathrm{i}\omega C+\dfrac{1}{Z(\omega)}}, \tag{7.150}$$

从这个连分式中解出 $Z(\omega)$，有

$$Z(\omega)=\frac{R}{2}+\left(\frac{R^2}{4}+\frac{R}{\mathrm{i}\omega C}\right)^{1/2}. \tag{7.151}$$

在 R 和 C 两者都很小的极限下 (当然依赖于电缆的细节长度)，而两者的比值 $R/C=\xi^2$ 保持一个常量，可获得 $Z(\omega)\to\xi(\mathrm{i}\omega)^{-1/2}$，所以

$$I(\omega)=\frac{V(\omega)}{Z(\omega)}=(\mathrm{i}\omega)^{1/2}V(\omega). \tag{7.152}$$

这里，为方便起见, 令 $\xi=1$，变换到时间域上，有 $I(t)={}_{-\infty}D_t^{1/2}V(t)$，包含了半微分. 故电缆对一个在 $t=0$ 时刻施加的电压 $V(t)=v(t)\theta(t)$ 的响应为

$$I(t)={}_0D_t^{1/2}V(t). \tag{7.153}$$

正如黎曼–刘维尔所定义的那样，分数阶导数是用一个积分来计算，那么上述的电流描写了一种延迟响应

$$I(t)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^t M(t-t')V(t')\mathrm{d}t', \tag{7.154}$$

其中，记忆函数 $M(t)$ 以 $t^{-1/2}$ 为规律衰减的很慢. 因此可以说，分数阶导数是描述系统长幂律记忆线性响应的一个自然工具.

7.6.3 分数阶微积分的实现

分数阶微积分运算在自然界中是存在的，如生物的神经电脉冲信号等. 如果能在自然界找到或在实验室制备一种材料或器件，它的某些物理性质与分数阶微积分运算相同，那么就可以利用该物质进行分数阶微积分的等效运算，例如，化学物质锂肼流酸盐 ($\mathrm{LiN_2H_5SO_4}$)，该物质的复数阻抗与频率的平方根倒数成正比，则流

过该器件的电流与该器件的电压是 $\dfrac{1}{2}$ 阶微分关系.

在数学上，一些处处不可导的函数在分数阶微积分运算下可导，例如，正常布朗运动；分数阶微积分运算被应用于分形研究中，被广泛地使用在控制理论和信号分析与处理中；图 7.3 给出了三角形波信号和它的半阶导数；混沌动力学大都采用整数阶非线性微分方程来描述，现已有学者将分数阶微积分运算引入混沌动力学中；分数阶布朗运动和反常扩散是新近非平衡统计物理最为感兴趣的课题，分数阶朗之万方程被应用于金融物理、随机过程、预测与回归分析等方面.

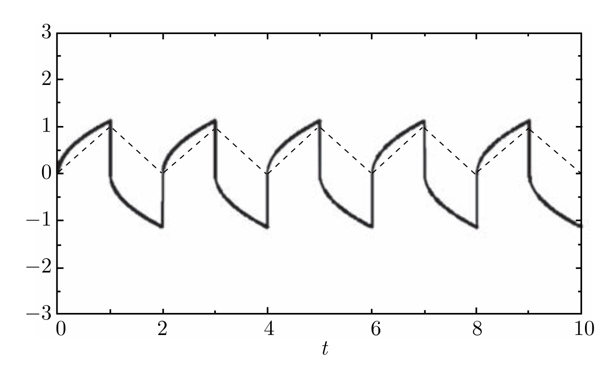


图 7.3　三角形波 (虚线) 和它的半阶导数 (实线)

【第 7 章附录 A：方均位移的计算】

粒子的方均位移定义为

$$\begin{aligned}\langle[x(t)-x(0)]^2\rangle &= \int_0^t\int_0^t\langle v(t_1)v(t_2)\rangle \mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2 \\ &= v^2(0)\left[\int_0^t E_{1,\nu}(-\gamma t'^{\nu})\mathrm{d}t'\right]^2+\frac{q}{\gamma^2}I,\end{aligned} \tag{7.155}$$

在方括号内的积分等于 $tE_{2,\nu}(-\gamma t^{\nu})$，通过将 Mittag-Lieffleur 函数展开成一个级数，第二项为

$$\begin{aligned}I &= \sum_{k,l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma)^{k+l}}{\Gamma(\nu k)\Gamma(\nu l)}\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^t \mathrm{d}t_2\int_0^{\min(t_1,t_2)}(t_1-t')^{\nu k-1}(t_2-t')^{\nu l-1}\mathrm{d}t' \\ &= \sum_{k,l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma)^{k+l}}{\Gamma(\nu k)\Gamma(\nu l)}I_{kl},\end{aligned} \tag{7.156}$$

若 $t_1\leftrightarrow t_2$，三重积分并不改变，则假设 $t_1<t_2$，我们可将它写为

$$I_{kl}=2\int_0^t \mathrm{d}t_2\int_0^{t_2}\mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t'(t_1-t')^{\nu k-1}(t_2-t')^{\nu l-1}. \tag{7.157}$$

用分数阶积分的规则和高斯广义超几何函数 ${}_2F_1$，这个积分能容易地计算出来.

$$\begin{aligned}I_{kl} &= 2\int_0^t \mathrm{d}t_2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \Gamma(\nu k)_0 I_{t_1}^{\nu k}(t_2-t_1)^{\nu l-1} \\ &= \frac{2\Gamma(\nu k)}{\Gamma(\nu k+1)}\int_0^t \mathrm{d}t_2 t_2^{\nu k+\nu l}\int_0^{t_2}\left(\frac{t_1}{t_2}\right)^{\nu k} {}_2F_1\left(1,1-\nu l;1+\nu k;\frac{t_1}{t_2}\right)\mathrm{d}\frac{t_1}{t_2} \\ &= \frac{2}{\nu k(\nu k+\nu l)}\int_0^t \mathrm{d}t_2 t_2^{\nu k+\nu l} = \frac{2t^{\nu k+\nu l+1}}{\nu k(\nu k+\nu l)(\nu k+\nu l+1)},\end{aligned} \tag{7.158}$$

代入方程 (7.156)，有

$$I_{kl} = 2t\sum_{k,l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma t^{\nu})^{k+l}}{\Gamma(1+\nu k)\Gamma(\nu l)(\nu k+\nu l)(\nu k+\nu l+1)}, \tag{7.159}$$

为了求出这个级数和在 $t\to\infty$ 的渐进行为，让我们注意

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2 I}{\mathrm{d}t^2} &= 2\sum_{k,l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma t^{\nu})^{k}}{\Gamma(1+\nu k)}\sum_{k,l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma t^{\nu})^{l-1}}{\Gamma(\nu l)} \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-\gamma t^{\nu})^{\nu k}}{\Gamma(1+\nu k)}\right]^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[E_{1,\nu}(-\gamma t^{\nu})-1\right]^2,\end{aligned} \tag{7.160}$$

对以上方程积分两次并考虑到 $I(t=0)=\left.\dfrac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t}\right|_{t=0}$，可给出粒子方均位移解析式：

$$\begin{aligned}\langle[x(t)-x(0)]^2\rangle &= v^2(0)\left[tE_{2,\nu}(-\gamma t^{\nu})\right]^2 \\ &\quad + \frac{q}{\gamma^2}\left\{t-2tE_{2,\nu}(-\gamma t^{\nu})+\int_0^t\left[E_{1,\nu}(-\gamma t^{\nu})\right]^2\mathrm{d}t\right\}.\end{aligned} \tag{7.161}$$

【第 7 章附录 B：求和计算】

我们能给出 (7.131) 式中双重求和 (记为 S_1) 的渐进行为. 首先求出这个求和的上限，这个求和的第二项的上限为

$$\begin{aligned}\frac{\Gamma(\nu k+\nu l+\nu-1)}{\Gamma(\nu k+\nu l+2\nu)} &= \frac{\Gamma(\nu k+\nu l+\nu)}{(\nu k+\nu l+\nu-1)\Gamma(\nu k+\nu l+2\nu)} \\ &< \frac{1}{\nu k+\nu l+\nu-1} < \frac{1}{\nu l},\end{aligned} \tag{7.162}$$

所以

$$S_1 < \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-\gamma t^{\nu})^{k}}{\Gamma(\nu+\nu k)}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma t^{\nu})^{l}}{\Gamma(1+\nu l)} = \left[E_{\nu,\nu}(-\gamma t^{\nu})-\frac{1}{\Gamma(\nu)}\right]\left[E_{1,\nu}(-\gamma t^{\nu})-1\right]. \tag{7.163}$$

当 $t\to\infty$，$S_1<1/\Gamma(\nu)$. 其次，为了得到这个求和在 $\dfrac{1}{2}<\nu<1$ 情况下的下限，我们乘以 t 后微分两次，有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}(S_1t)&>\sum_{k,l=1}^{\infty}\frac{(-\gamma)^{k+l}}{\Gamma(1+\nu k)\Gamma(\nu l)}\frac{\Gamma(\nu k+\nu l-1)}{\Gamma(\nu k+\nu l+2)}t^{\nu k+\nu l}\\&=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-\gamma)^k t^{\nu k}}{\Gamma(1+\nu k)}\right]^2=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[E_{1,\nu}(-\gamma t^{\nu})-1\right]^2.\end{aligned}\tag{7.164}$$

因为这个不等式对任何 t 都是成立的，我们能积分左边和右边，得出结论：当 $t\to\infty$，$S_1>\dfrac{1}{2}$.

习　　题

7-1　试用数学归纳法证明如下的积分等式:

$$\int_a^x\int_a^{y_1}\cdots\int_a^{y_{n-1}}f(y_n)\mathrm{d}y_n\cdots\mathrm{d}y_1=\frac{1}{(n-1)!}\int_a^x(x-y)^{n-1}f(y)\mathrm{d}y.$$

为了证实 (7.16) 式的成立，试利用数学归纳法即假设此式对 p 成立，那么对 $p+1$ 也成立

$${}_aD_t^{-p-1}f(t)=\frac{1}{p!}\int_0^t(t-\tau)^p f(\tau)\mathrm{d}\tau.$$

为此, 可引入 $f_1(t)=\displaystyle\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau$.

7-2　试就 (p,q) 取四种正负组合情况，证明分数阶导数和分数阶序积分的合成律.

7-3　基于欧拉 –贝塔 (Euler's Beta) 函数的定义

$$\begin{aligned}\mathrm{B}(b+1,d+1)x^{b+d+1}&\equiv\frac{\Gamma(b+1)\Gamma(d+1)}{\Gamma(b+d+2)}x^{b+d+1}\\&=\int_0^x\mathrm{d}t(x-t)^b t^d=\int_0^x\mathrm{d}t t^b(x-t)^d,\quad b,d>-1.\end{aligned}$$

求证幂函数 x^p 的 $(1-\gamma)$ $(0<\gamma<1)$ 分数阶导数为

$${}_0D_x^{1-\gamma}x^p=\frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p+\gamma)}x^{p-1+\gamma},$$

据此显示阿贝尔 (Abel) 积分方程

$$xf(x)=\int_0^x\mathrm{d}t(x-t)^{-1/2}f(x),$$

其解为 $f(x) = x^{-3/2}\mathrm{e}^{-\pi/x}$.

7-4　拉普拉斯变换和傅里叶变换是求解分数阶微分和积分方程的有用工具，求证以下两个关系

$$
{}_0D_t^{\alpha} f(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} t^{\alpha-1} * f(t);
$$
$$
{}_{-\infty}D_x^{\mu} f(x) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} x^{\mu-1} \star f(x),
$$

其中，$*$ 和 $\star$ 分别表示拉普拉斯卷积和傅里叶卷积.

7-5　求证以下积分方程

$$
\int_0^y \frac{1}{(y^2 - x^2)^{\beta}} \psi(x)\mathrm{d}x = f(y)
$$

的解是

$$
\psi(\sqrt{t}) = \frac{2\sqrt{t}}{\Gamma(1-\beta)}\ {}_0D_t^{1-\beta} f(\sqrt{t}).
$$

7-6　试用分数阶导数的拉普拉斯变换，求解以下分数阶微分方程

$$
{}_0D_t^{1/2} f(t) + af(t) = 0 \quad (t > 0); \qquad [{}_0D_t^{-1/2} f(t)]_{t=0} = C
$$

的解为

$$
f(t) = C\left(\frac{1}{\sqrt{\pi t}} - \mathrm{e}^t \mathrm{erf}(\sqrt{t})\right)
$$

7-7　试用分数阶导数的傅里叶变换，分析具有分数阶阻尼项的振荡方程

$$
y''(t) + a\ {}_{-\infty}D_t^{\alpha} y(t) + by(t) = f(t).
$$

第 8 章　分数阶朗之万方程

本章导读：在一些远离平衡的复杂系统中，弛豫为关于时间的幂律衰减，那么需将朗之万方程中的阻尼速度改为分数阶速度，则与时间有关的衰减项为 Mittag-Leffler 函数. 基于拉普拉斯变换技术对分数阶振子和线性分数阶朗之万方程进行精确求解. 以振子是否穿过零线来判别系统是处于欠阻尼或过阻尼环境，则分数阶速度阻尼的强弱依赖于扩散指数. 最后将分数阶朗之万方程应用于资产价格动力学.

为了保证通常的统计物理和用朗之万方程表达的动力学描述的有效性，那么微观和宏观时间尺度应该具有分离性. 当微观时间尺度发散，在宏观尺度上的微分方程不再适用，而必须用分数阶微分方程来代替.

扩散是一种基本的非平衡现象. 正常扩散作为一个高斯过程已经在布朗运动理论中被很好地描述，其在空间和时间均是局域化的. 正常扩散的特征是粒子的渐进方均位移随时间线性地增长. 然而，大量的实验观测显示在复杂系统中，粒子的方均位移并不是正比于时间. 反常扩散的动力学起源来自于空间或时间的非局域性. 一个著名的空间非局域性的例子是莱维稳定运动[①]，由于存在非常长的跳跃，它的方均位移实际上为无限大；而时间非局域性显示记忆效应. 两者都得出了自由粒子的渐进方均位移不是时间的线性函数，即 $\langle x^2(t)\rangle \propto t^\alpha (0 \leqslant \alpha \leqslant 2)$. 数学上有多种方式来实现这一结果，下面提及两种最简单的方式.

一、分数阶布朗运动(fBm)

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \alpha D t^{\alpha-1}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t), \tag{8.1}$$

其解为一个高斯分布:

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t^\alpha}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt^\alpha}\right). \tag{8.2}$$

那么，fBm 描写的是一个高斯输运. 注意到方程 (8.1) 在时间上是局域的 (无记忆核). 非马尔可夫特性表现在一个时间有关的扩散常数，$D_\alpha(t) = \alpha D t^{\alpha-1}$.

---

① 这里稳定的含义是：虽然粒子存在长程跳跃，但它每次位移的随机变化长度满足一个确定的定常分布.

二、分形时间过程(ftp)

对于 ftp，扩散方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)=\frac{D}{\Gamma(\alpha-1)}\int_0^t\frac{\mathrm{d}\tau}{(t-\tau)^{2-\alpha}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,\tau),\tag{8.3}$$

包含了一个记忆核，以致于分布密度函数 $P(x,t)$ 是非高斯的. 方程 (8.3) 的解在拉普拉斯空间写为

$$P(x,z)=\frac{1}{2D^{1/2}z^{1-\alpha/2}}\exp\left(-\frac{|x|z^{\alpha/2}}{D^{1/2}}\right).\tag{8.4}$$

在时间域上，用 Fox 函数或者单边莱维稳定分布，可以将 $P(x,t)$ 表示成一个闭合的形式. 通过进一步引入黎曼–刘维尔分数阶导数 $(0<\lambda<1)$

$$\frac{\partial^\lambda f(t)}{\partial t^\lambda}=\frac{1}{\Gamma(-\lambda)}\int_0^t\frac{f(\tau)\mathrm{d}\tau}{(t-\tau)^{\lambda+1}}.\tag{8.5}$$

方程 (8.3) 能重新写成一个分数阶扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)=D\frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t).\tag{8.6}$$

当 $\alpha=1$，方程 (8.1) 和 (8.6) 均退化为正常扩散方程.

值得指出的是，关于布朗运动的朗之万方程和扩散方程的描写，在非马尔可夫情形下的相空间不再是完全等价的. 其中朗之万方程包含更多的信息，而且看起来更加基本.

这一节用分数阶朗之万方程探讨随机过程的唯象描写. 虽然对于简单的系统，记忆摩擦核为一个指数衰减函数或一个 δ 函数，但是在远离平衡的复杂系统中，一些情况下图像是不同的，即弛豫为一种幂律型，并且粒子可能存在反常扩散和弛豫. 数学上，分数阶导数实际上是一个积分运算，与广义朗之万方程中的记忆阻尼的效应类似.

8.1 分数阶振子和分数阶速度

8.1.1 分数阶振子动力学

简谐振子是一个最简单的力学系统，在物理世界中是一个普遍的模型，怎么说都不为过. 它的运动由一个常系数二阶线性微分方程所描写. 费恩曼物理学讲义对简单谐振子动力学的诸属性做了明晰的处理.

简谐振子运动的积分方程写作

$$x(t)=x(0)+\dot{x}(0)t-\omega^2\int_0^t(t-t')x(t')\mathrm{d}t',\tag{8.7}$$

其中，$x(0)$ 和 $\dot{x}(0)$ 为谐振子的初始坐标和速度，ω 是圆频率. 其实它是微分方程：$\ddot{x}(t)+\omega^2x(t)=0$ 的一种形式解. 若将方程 (8.7) 右端的积分项推广到 α 序的分数阶积分，则可得到分数阶振子的运动方程

$$x(t)=x(0)+\dot{x}(0)t-\frac{\omega^2}{\Gamma(\alpha)}\int_0^t(t-t')^{\alpha-1}x(t')\mathrm{d}t', \tag{8.8}$$

这里 $1<\alpha\leqslant 2$，当 $\alpha=2$，恢复到方程 (8.7)，故方程 (8.8) 描写的是欠扩散①. 该方程的初始条件与正常振子的一样. 这个方程的解能对其两边实施拉普拉斯变换而获得：

$$\hat{x}(s)=\frac{x(0)}{s}+\frac{\dot{x}(0)}{s^2}-\omega^2\frac{\hat{x}(s)}{s^\alpha}, \tag{8.9}$$

其中，$\hat{x}(s)=\displaystyle\int_0^\infty \exp(-st)x(t)\mathrm{d}t$.

从方程 (8.9) 解出 $\hat{x}(s)$，有

$$\hat{x}(s)=\frac{x(0)s^{-1}}{1+\omega^2s^{-\alpha}}+\frac{\dot{x}(0)s^{-2}}{1+\omega^2s^{-\alpha}}, \tag{8.10}$$

再作逆拉普拉斯变换，而给出解：

$$x(t)=x(0)E_{\alpha,1}(-\omega^2t^\alpha)+\dot{x}(0)tE_{\alpha,2}(-\omega^2t^\alpha), \tag{8.11}$$

这里，逆拉普拉斯变换是基于广义 Mittag-Leffler 函数而确定出，即

$$E_{\alpha,\beta}(z)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{z^k}{\Gamma(\alpha k+\beta)}, \tag{8.12}$$

那么

$$L^{-1}\left(\frac{s^{-1}}{1+\omega^2s^{-\alpha}}\right)=E_{\alpha,1}(-\omega^2t^\alpha), \tag{8.13}$$

$$L^{-1}\left(\frac{s^{-2}}{1+\omega^2s^{-\alpha}}\right)=tE_{\alpha,2}(-\omega^2t^\alpha). \tag{8.14}$$

方程 (8.11) 就是由方程 (8.8) 描写的分数阶振子运动方程的解. 不失一般性，初始条件假设为 $x(0)=x_0$ 和 $\dot{x}(0)=0$，则

$$x(t)=x_0E_{\alpha,1}(-\omega^2t^\alpha). \tag{8.15}$$

① 注意在不同的场合下，幂律指数也称反常扩散指数，但两者取值范围是不一样的，这只是写法上的方便，而最终描写的行为是一致的. 一个简便的判断方法是看恢复到正常情况的参数值是取反常指数范围的左、右极限还是中间情况？前者为超扩散，中间者为欠扩散，而后者系覆盖了所有扩散情况.

8.1.2 总能量和相平面表示

已知正常谐振子的总能量定义为

$$E_H = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}^2, \tag{8.16}$$

而它的动力学可以用一个相平面图来表示. 在简单谐振子情况下，运动是周期的，总能量为一个运动常量，以致相平面图是一个闭合曲线，即一个椭圆. 对于一个欠阻尼谐振子，运动是震荡的，总能量降低，并且相平面图不再是闭合的，而是一个对数螺旋型. 其他类型的行为在临界阻尼和过阻尼运动情况下也易于理解.

这里提出分数阶振子的广义动量的定义:

$$p = m\left(\frac{\mathrm{d}^{\alpha-2}\dot{x}}{\mathrm{d}t^{\alpha-2}}\right), \tag{8.17}$$

总能量写作：

$$E_F = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}^{\alpha-2}\dot{x}}{\mathrm{d}t^{\alpha-2}}\right)^2. \tag{8.18}$$

需要指出的是参量 m 并不具有通常简单谐振子的质量的量纲. 广义动量 p 之所以按这个方式定义，是因为式子 $p^2/(2m)$ 应具有能量的量纲. 此外，方程 (8.17) 和 (8.18) 中的导数也被称为阶数为 $\alpha-2$ 的 Caputo 型分数阶导数. β 阶 Caputo 型分数阶导数的定义为

$$\frac{\mathrm{d}^{\beta}f}{\mathrm{d}t^{\beta}} = \frac{1}{\Gamma(n-\beta)}\int_0^t \frac{f^{(n)}(\tau)\mathrm{d}\tau}{(t-\tau)^{\beta+1-n}}, \quad (n-1) < \beta < n. \tag{8.19}$$

当 $\alpha=2$ 时，方程 (8.17) 和 (8.18) 中的动量和能量定义退化为正常振子情况. 时间有关的分数阶动量和能量的表达式分别为

$$p = -mx_0\omega^2 t^{\alpha/2}E_{\alpha,1+\alpha/2}(-\omega^2 t^{\alpha}) \tag{8.20}$$

和

$$E_F = \frac{1}{2}kx_0^2[E_{\alpha,1}(-\omega^2 t^{\alpha})]^2 + \frac{1}{2}mx_0^2\omega^4 t^{\alpha}[E_{\alpha,1+\alpha/2}(-\omega^2 t^{\alpha})]^2. \tag{8.21}$$

对于 $\alpha=2$，方程 (8.15) 的位移为一个余弦函数，相图是一个闭合的曲线，总能量是守恒的. 当 α 小于 2 时，位移具有一个阻尼谐振子的行为，其还是振荡的，但振幅随时间降低，在相空间显示为一个螺旋型轨道. 图 8.1 显示总能量不为一个常量，而是随时间降低.

如果振幅随时间衰减，那么可以预期总能量不是一个运动积分，结果带来相平面轨道不是一个闭合的曲线，见图 8.2. 令人惊讶的是运动方程的阻尼内在性，不像

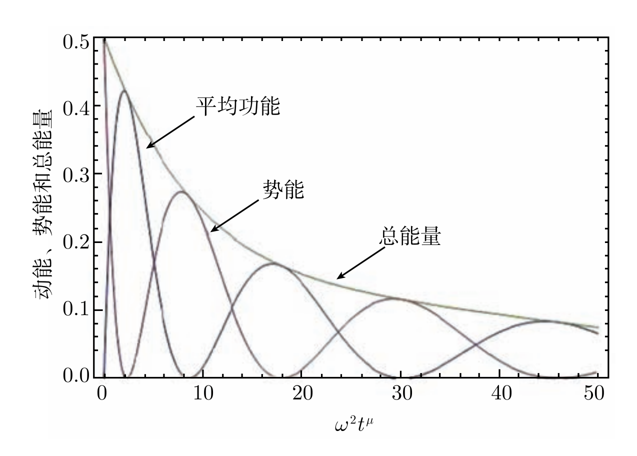


图 8.1　分数阶振子的平均动能、势能和总能量随时间的变化，参数为 $\mu = 1.85$

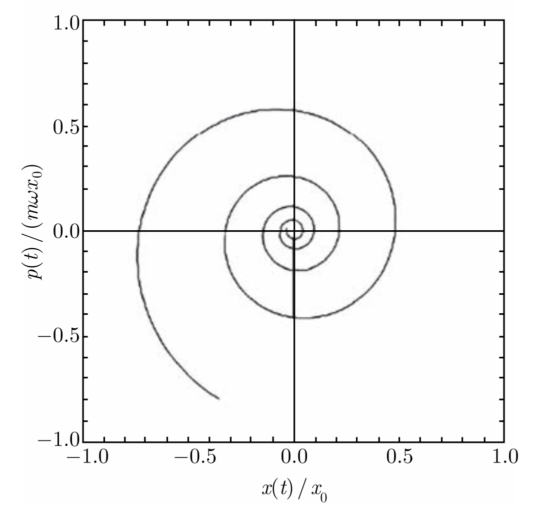


图 8.2　动量坐标的相图，参数为 $\mu = 1.85$

在阻尼谐振子情况那样，通过一个附加力而引入. 阻尼力效应是由于小于 2 的参数 α 而引起的. 事实上，基于 Mittag-Leffler 函数给出的解能够表示成两部分之和. 第一部分是单调下降的，当 α 假设成整数值，并不出现；第二部分包含一个指数项修正的振荡部分，当参数 α 小于 2，它是一个下降函数，但是当参数 α 大于 2 小于 3，它是一个增函数. 然而，当参数 α 小于 1 时，第二部分等于零，解仅有第一部分. 此外，如果初始条件是 $x(0) = 0$，但 $\dot{x}(0) \neq 0$，那么位移由方程 (8.11) 的第二项给出.

总之，在孤立的情况下，简单谐振子的总能量守恒，但若它与其他系统相互作用，则存在阻尼，它的能量要降低. 分数阶振子虽像一个谐振子，但不被孤立，而

是携带阻尼机制. 如此内在阻尼的缘故是引人入胜的，所以说分数阶振子动力学是值得深入研究的.

8.2 分数阶朗之万方程的建立

分数阶朗之万方程是一个含幂律记忆核的广义朗之万方程，写作

$$m\frac{\mathrm{d}^2x(t)}{\mathrm{d}t^2}=F(x)-\bar{\gamma}\int_0^t\frac{1}{(t-t')^{\alpha}}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t'}\mathrm{d}t'+\xi(t),\tag{8.22}$$

其中，$\bar{\gamma}>0$ 为广义摩擦系数，$F(x)$ 为一个外部力场，$\alpha(0<\alpha<1)$ 是一个分数，$\xi(t)$ 为一个稳定的分数阶高斯噪声，满足涨落耗散定理:

$$\langle\xi(t)\rangle=0,\quad\langle\xi(t)\xi(t')\rangle=k_{\mathrm{B}}T\bar{\gamma}|t-t'|^{-\alpha}.\tag{8.23}$$

方程 (8.22) 另外的方便写法为

$$m\ddot{x}=F(x)-\bar{\gamma}\Gamma(1-\alpha)\frac{\mathrm{d}^{\alpha}x}{\mathrm{d}t^{\alpha}}+\xi(t),\tag{8.24}$$

其中，分数阶导数的定义为 (8.5) 式.

对于一个简谐力场

$$F(x)=-m\omega^2x,\tag{8.25}$$

其已被用来描写单一粒子动力学 $\left(\alpha=\dfrac{1}{2}\right)$，所以这里首先关注实验观测量. 用到热初始条件: $\langle\xi(t)x(0)\rangle=0$、$\langle x^2(0)\rangle=k_{\mathrm{B}}T/(m\omega^2)$ 和 $\langle x(0)v(0)\rangle=0$. 一个实验观测量是归一化的关联函数

$$C_x(t)=\frac{\langle x(t)x(0)\rangle}{\langle x^2(0)\rangle},\tag{8.26}$$

在拉普拉斯空间，方程 (8.24) 变为一个代数方程，利用卷积定理，我们发现解的拉普拉斯变换是

$$\begin{aligned}\hat{x}(s)=&\frac{s+(1/m)\hat{\beta}(s)}{s^2+(1/m)s\hat{\beta}(s)+\omega^2}x_0+\frac{1}{s^2+(1/m)s\hat{\beta}(s)+\omega^2}v_0\\&+\frac{1}{s^2+(1/m)s\hat{\beta}(s)+\omega^2}\hat{\xi}(s),\end{aligned}\tag{8.27}$$

这里 x_0 和 v_0 为初始条件，并且

$$\hat{\beta}(s)=\bar{\gamma}\Gamma(1-\alpha)s^{\alpha-1}.\tag{8.28}$$

从方程 (8.27)，我们发现

$$\hat{C}_x(s) = \frac{s + \gamma s^{\alpha-1}}{s^2 + \gamma s^\alpha + \omega^2}, \tag{8.29}$$

其中, $\gamma = \bar{\gamma}\Gamma(1-\alpha)/m$. 容易证明 $C_x(t)$ 满足下列分数阶方程:

$$\ddot{C}_x(t) + \omega^2 C_x(t) + \gamma \frac{\mathrm{d}^\alpha C_x(t)}{\mathrm{d}t^\alpha} = 0, \tag{8.30}$$

初始条件为 $C_x(0) = 1$ 和 $\dot{C}_x(0) = 0$. 其中分数阶导数按 Caputo 定义为

$$\frac{\mathrm{d}^\alpha f(t)}{\mathrm{d}t^\alpha} = {}_0D_t^{\alpha-1}\left[\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\right], \tag{8.31}$$

其中，${}_0D_t^{\alpha-1}$ 为黎曼–刘维尔分数阶算符：

$${}_0D_t^{\alpha-1} f(t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} f(t')\mathrm{d}t'. \tag{8.32}$$

因为方程 (8.22) 存在另外一种写法：

$$\ddot{x} + \gamma \frac{\mathrm{d}^\alpha x}{\mathrm{d}t^\alpha} + \omega^2 x = \xi(t). \tag{8.33}$$

所以命名为分数阶朗之万方程是恰当的. 对于力自由粒子，[方程 (8.22) 中的 $F(x) = 0$]，有 $\langle x^2(t)\rangle \sim t^\alpha$，因为 $0 < \alpha < 1$，故分数阶朗之万方程描写的是欠扩散.

一般情况下和特殊的分数阶朗之万方程，均能从一个布朗粒子耦合到一个简谐热库的 Kac-Zwanzig 模型获得. 由方程 (8.30) 所描写的关联函数 $C_x(t)$ 也能从分数阶克拉默斯方程导出. 不过，分数阶克拉默斯方程并不对应一个高斯过程，而且高阶矩可能不同于分数阶朗之万方程的描述. 像方程 (8.30) 和 (8.33) 的分数阶微分方程的用途最近十分普遍，例如，断裂表面，特别是反常扩散领域，几个分数阶振子方程已经被考虑了；在数学上已给出了分数阶微分方程 (8.30) 的一般解.

本节将给出方程 (8.30) 的解，所提出的方法具有一般性，也能运用于其他线性分数阶微分方程；从一个更加物理的观点来考虑下列问题：① 什么时候 $C_x(t)$ 是正的 (类似于 $\alpha = 1$ 的过阻尼行为)? ② 什么时候 $C_x(t)$ 是非单调的 (类似于 $\alpha = 1$ 的欠阻尼行为)? ③ 与正常情况下的临界频率 $\omega_\mathrm{c} = \dfrac{\gamma}{2}$ 相类似的条件是什么? ④ 是否存在一个临界指数 α_c，其值为多大?

8.2.1　一般解

现在提供一个解析求解方程 (8.30) 的技巧. 在拉普拉斯空间，$C_x(t)$ 的公式为方程 (8.29)，如果 α 为一整数，那么用极点分析进行逆拉普拉斯变换是简单的，这是因为方程 (8.29) 的分母为一多项式. 假设 α 具有 $\alpha = \dfrac{p}{q}$ 的形式，这里 $q > p > 0$ 为整数，而 p/q 不可约分 (即不等于 l/n，这里 $l < p$ 和 $n < q$ 为整数).

1. 方法一

将方程 (8.29) 重写为

$$\hat{C}_x(s)=\frac{s+\gamma s^{p/q-1}}{s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2}\frac{\hat{Q}(s)}{\hat{Q}(s)}=\frac{(s+\gamma s^{p/q-1})\hat{Q}(s)}{\hat{P}(s)}, \tag{8.34}$$

其中，$\hat{P}(s)$ 为一个 s 的多项式. 按照数学理论，人们总是能发现 $\hat{Q}(s)$, 从而方程 (8.34) 的分母

$$\hat{P}(s)=(s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2)\hat{Q}(s) \tag{8.35}$$

是一个关于 s 的常规多项式. 多项式 $\hat{Q}(s)$ 被称为余多项式，发现它的任务是简单的：$\hat{Q}(s)$ 为一个关于 $s^{1/q}$ 的最高阶是 $2q(q-1)$ 的多项式，则

$$\hat{Q}(s)=\sum_{m=0}^{2q(q-1)}B_m s^{m/q}, \tag{8.36}$$

式中，$B_{2q(q-1)}=1$. 系数 B_m 能从 $\hat{Q}(s)(s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2)=\hat{P}(s)$ 而非整数阶系数等于零来确定. 这产生出一个 $2q(q-1)$ 维线性方程组，原则上是可解的.

假设所有 $2q$ 个 $\hat{P}(s)$ 的零根是相异的，推广到非相异零根情况将在以后讨论，如此行为是与临界频率相关的. 用部分分式公式

$$\frac{1}{\hat{P}(s)}=\sum_{k=1}^{2q}\frac{A_k}{s-a_k}, \tag{8.37}$$

其中，a_k 是 $\hat{P}(s)=0$ 的解，A_k 是常数，由下式定出

$$A_k^{-1}=\left.\frac{\mathrm{d}\hat{P}(s)}{\mathrm{d}s}\right|_{s=a_k}. \tag{8.38}$$

可以证明

$$\frac{s^m}{\hat{P}(s)}=\sum_{k=1}^{2q}\frac{a_k^m A_k}{s-a_k},\quad m=0,1,\cdots,2q-1. \tag{8.39}$$

用展开式，方程 (8.34) 的分子可写作

$$\hat{Q}(s)(s+\gamma s^{p/q-1})=\sum_{m=0}^{2q-1}\sum_{j=0}^{q-1}\tilde{B}_{mj}s^{m-j/q}, \tag{8.40}$$

所以用方程 (8.34)、(8.37) 和 (8.40)，有

$$\hat{C}_x(s)=\sum_{m=0}^{2q-1}\sum_{j=0}^{q-1}\sum_{k=1}^{2q}\frac{a_k^m\tilde{B}_{mj}A_k}{s-a_k}s^{-j/q}. \tag{8.41}$$

故最终我们计算方程 (8.29) 的逆拉普拉斯变换，约化为完成如下的逆拉普拉斯变换：

$$\frac{1}{s-a_k} \div \mathrm{e}^{a_k t}, \tag{8.42}$$

$$\frac{1}{s^{j/q}(s-a_k)} \div \frac{\mathrm{e}^{a_k t}}{\Gamma\left(\dfrac{j}{q}\right) a_k^{j/q}} \gamma\left(\frac{j}{q}, a_k t\right), \tag{8.43}$$

其中，$\gamma(j/q, a_k t)$ 是一个不完全伽马函数，$f(s) \div f(t)$ 代表拉普拉斯变换对. 用 $\gamma(a,x)$ 的级数展开

$$\gamma(a,x) = \Gamma(a) x^a \mathrm{e}^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(a+n+1)} \tag{8.44}$$

和广义 Mittag-Leffler 函数，重写方程 (8.43) 为

$$\frac{1}{s^{j/q}(s-a_k)} \div t^{j/q} E_{1,1+j/q}(a_k t). \tag{8.45}$$

Mittag-Leffler 函数满足

$$E_{\eta,\mu}(y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{\Gamma(\eta n + \mu)}, \tag{8.46}$$

并且

$$E_{\eta,\mu} \sim -\frac{y^{-1}}{\Gamma(\mu - \eta)}, \quad y \to \infty. \tag{8.47}$$

小结

为了完成方程 (8.29) 的逆拉普拉斯变换，需要着手四项工作：

(1) 计算 $\hat{Q}(s)$，这等价于对 $2q(q-1) \times 2q(q-1)$ 矩阵的对角化；

(2) 找出 $\hat{P}(s)$ 的零根 a_k 和部分分式 [方程 (8.38)] 中的系数 A_k；

(3) 发现方程 (8.40) 中的系数 B_{mj}，将 $\hat{C}_x(s)$ 写成 (8.41) 式和的形式;

(4) 用方程 (8.42) 和 (8.43) 去完成方程 (8.41) 的逆拉普拉斯变换.

最终，

$$C_x(t) = \sum_{m=0}^{2q-1} \sum_{j=0}^{q-1} \sum_{k=1}^{2q} \frac{a_k^{m-j/q} \tilde{B}_{mj} A_k \mathrm{e}^{a_k t}}{\Gamma(j/q)} \gamma\left(j/q, a_k t\right), \tag{8.48}$$

这里，当 $j=0$ 时，$\gamma(j/q, a_k t)/\Gamma(j/q) = 1$，或者用方程 (8.44)，有

$$C_x(t) = \sum_{m=0}^{2q-1} \sum_{j=0}^{q-1} \sum_{k=1}^{2q} a_k^m \tilde{B}_{mj} A_k t^{j/q} E_{1,1+j/q}(a_k t), \tag{8.49}$$

对于 $j=0$，$E_{1,1+j/q}(a_k t) = \mathrm{e}^{a_k t}$.

现在，已经有了一个发现分数阶阻尼振子解析解的实际工具，因为 $\gamma(a,x)$ 已在 Mathematica 程序中列表了，其是一个不完全伽马函数的有限和.

2. 方法二

一般来说，必须求解含 $2q(q-1)$ 个变量的 $2q(q-1)$ 个线性方程组. 不过对于方程 (8.29) 的特殊情况，我们将提供一个发现 $\hat{Q}(s)$ 和 $\hat{P}(s)$ 的简单方法. 改写下式

$$C_x(s) = \frac{s+\gamma s^{p/q-1}}{(s^2+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q s^p}\left[\frac{(s^2+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q s^p}{s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2}\right], \tag{8.50}$$

我们有

$$\hat{Q}(s) = \frac{(s^2+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q s^p}{s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2} \tag{8.51}$$

和

$$\hat{P}(s) = (s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2)\hat{Q}(s) = (s^2+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q s^p. \tag{8.52}$$

人们能容易看到 $\hat{P}(s)$ 的确是关于 s 的多项式. 至于 $\hat{Q}(s)$，它是两个关于 $s^{1/q}$ 的多项式相除，也是 $s^{1/q}$ 的多项式. 因为两个多项式的分式

$$\frac{(y^{2q}+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q y^{qp}}{y^{2q}+\gamma y^p+\omega^2} \tag{8.53}$$

为 y 的多项式，我们看到 $y^{2q}+\gamma y^p+\omega^2=0$ 的任何解也是 $(y^{2q}+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q y^{qp}=0$ 的一个解，完成 $y=s^{1/q}$ 的代换并进入 (8.53) 式，可以发现 $\hat{Q}(s)$ 的确是 $s^{1/q}$ 的一个多项式. 找到 $\hat{Q}(s)$ 和 $\hat{P}(s)$ 之后，我们再回到方法一，并且利用方程 (8.37)~(8.40)，进而写出最终的解.

8.2.2 $\alpha=1/2$ 和 $\alpha=3/4$ 的例子

1. $\alpha=1/2$

$\alpha=\dfrac{1}{2}$ 的情况最近在实验 (Burov et al., 2008b) 中被测量，它作为第一个例子加以说明. 从方程 (8.29)，我们得到

$$\hat{C}_x(s) = \frac{s+\gamma s^{-1/2}}{s^2+\gamma s^{1/2}+\omega^2}, \tag{8.54}$$

那么

$$B_4=1,\quad B_3=B_2=0,\quad B_1=-\gamma,\quad B_0=\omega^2, \tag{8.55}$$

$$\hat{Q}(s) = s^2-\gamma s^{1/2}+\omega^2. \tag{8.56}$$

因为

$$\hat{P}(s) = \hat{Q}(s)(s^2 + \gamma s^{1/2} + \omega^2) = s^4 + 2\omega^2 s^2 - \gamma^2 s + \omega^4, \tag{8.57}$$

重新写方程 (8.54)

$$\hat{C}_x(s) = \frac{s^3 + \omega^2 s - \gamma^2 + \gamma\omega^2 s^{-1/2}}{(s^2 + \omega^2)^2 - \gamma^2 s}, \tag{8.58}$$

注意方程 (8.58) 的分母的阶数，即 $\hat{P}(s)$ 关于 s 的最高阶数为 4. 利用 Ferrari 公式，$\hat{P}(s)$ 等于零的根易于找出，记为 a_k，$k = 1, \cdots, 4$. 由方程 (8.37) 确定的部分分数阶公式的系数 A_k 为

$$A_k = \frac{1}{4a_k(a_k^2 + \omega^2) - \gamma^2}. \tag{8.59}$$

用方程 (8.41)，部分分式公式为

$$\hat{C}_x(s) = \sum_{m=0}^{3}\sum_{j=0}^{1}\sum_{k=1}^{4} \frac{a_k^m \tilde{B}_{mj} A_k}{s - a_k} s^{-j/q}, \tag{8.60}$$

其中，方程 (8.40) 中的系数 $\tilde{B}_{mj}$ 由方程 (8.58) 的分子来发现

$$\tilde{B}_{30} = 1, \quad \tilde{B}_{10} = \omega^2, \quad \tilde{B}_{00} = -\gamma^2, \quad \tilde{B}_{01} = \gamma\omega^2, \tag{8.61}$$

其他矩阵元 $\tilde{B}_{mj}$ 等于零. 用方程 (8.49)，则解是

$$C_x(t) = \sum_{k=1}^{4}[(-\gamma^2 + \omega^2 a_k + a_k^3)A_k \mathrm{e}^{a_k t} + \gamma\omega^2 A_k t^{1/2} E_{1,3/2}(a_k t)]. \tag{8.62}$$

利用级数展开和一些代数，我们能够解出 a_k，则 (8.62) 式具有以下的渐进行为：

$$C_x(t) = \begin{cases} 1 - \dfrac{1}{2}\omega^2 t^2 + \dfrac{\gamma\omega^2}{\Gamma(9/2)} t^{7/2}, & t \to 0; \\ \dfrac{\gamma}{\omega^2 \Gamma(1/2)} t^{-1/2} - \left(\dfrac{\gamma}{\omega^2}\right)^3 \dfrac{t^{-3/2}}{2\Gamma(1/2)}, & t \to \infty. \end{cases} \tag{8.63}$$

我们看到 $C_x(t)$ 长时间后按一个负幂律衰减，这就是慢弛豫和反常扩散的特征.

渐进公式 (8.63) 提供了长时和短时行为，但中间的行为还是未知的. 用精确解 [方程 (8.62)] 在图 8.3 画出了不同的 ω 值的 $C_x(t)$. 存在三种典型的行为: ① 单调下降; ② 在非负半平面的非单调衰减，$C_x(t) \geqslant 0$; ③ 振荡解, 此时 $C_x(t)$ 可以取负值. 把 $\omega = \omega_z = 1.053$ 看做一个分数阶临界点，在这个意义上，如果 $\omega > \omega_z$，$C_x(t)$ 穿过零，那么对于 $\alpha = \dfrac{1}{2}$，存在另外一个分数阶临界点 $\omega_m = 0.426$，当 $\omega < \omega_m$，$C_x(t)$ 单调衰减.

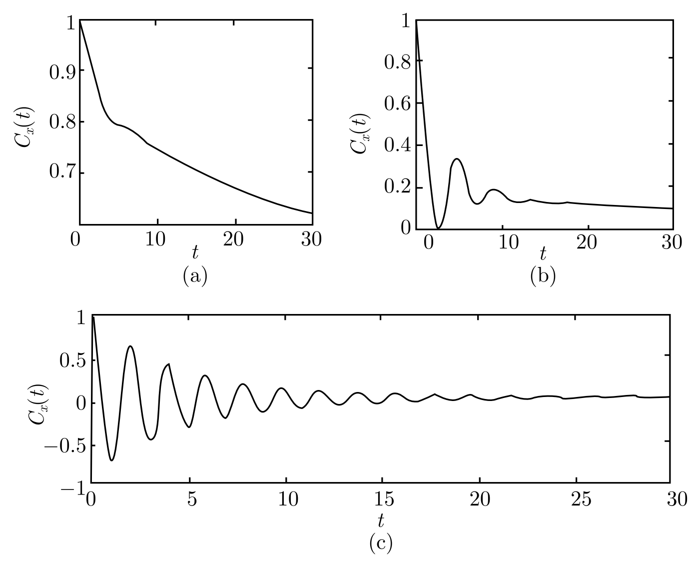


图 8.3 不同的 ω 值的 $C_x(t)$

2. $\alpha = 3/4$

这一节用方式二说明 $\alpha = \dfrac{3}{4}$ 的解，目标在于进行方程 (8.29) 的逆拉普拉斯变换，

$$\hat{C}_x(s) = \frac{s + \gamma s^{3/4-1}}{s^2 + \gamma s^{3/4} + \omega^2}. \tag{8.64}$$

我们发现互补多项式 $\hat{Q}(s)$ 和 $\hat{P}(s)$，利用方程 (8.34) 和 (8.35)，有

$$\hat{P}(s) = (s^2 + \omega^2)^4 - \gamma^4 s^3, \tag{8.65}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q}(s) &= \frac{(s^2 + \omega^2)^4 - \gamma^4 s^3}{s^2 + \gamma s^{3/4} + \omega^2} \\ &= s^6 - \gamma s^{19/4} + 3\omega^2 s^4 + \gamma^2 s^{7/2} - 2\omega^2 \gamma s^{11/4} - \gamma^3 s^{9/4} \\ &\quad + 3\omega^4 s^2 + \omega^2 \gamma^2 s^{3/2} - \gamma \omega^4 s^{3/4} + \omega^6,\end{aligned} \tag{8.66}$$

以致于我们能将方程 (8.64) 写成

$$\begin{aligned}&\hat{C}_x(s) \\ &= \frac{s^7 + 3\omega^2 s^5 + \gamma\omega^2 s^{15/4} + 3\omega^4 s^3 - \gamma^2\omega^2 s^{5/2} - \gamma^4 s^2 + 2\gamma\omega^4 s^{7/4} + \omega^6 s - \gamma^2\omega^4 s^{1/2} + \gamma\omega^6 s^{-1/4}}{(s^2+\omega^2)^4 - \gamma^4 s^3}\end{aligned} \tag{8.67}$$

利用卷积定理以及方程 (8.24)，$C_x(t)$ 的拉普拉斯变换为

$$\hat{C}_x(s) = \frac{s + \gamma s^{p/q-1}}{s^2 + \gamma s^{p/q} + \omega^2}, \tag{8.68}$$

其中，$\gamma=\bar{\gamma}\Gamma(1-\alpha)/m$，重写方程 (8.68)

$$\hat{C}_x(s)=\frac{(s+\gamma s^{p/q-1})\hat{Q}(s)}{\hat{P}(s)}, \tag{8.69}$$

这里

$$\hat{Q}(s)=\frac{(s^2+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q s^p}{s^2+\gamma s^{p/q}+\omega^2}, \tag{8.70}$$

$$\hat{P}(s)=(s^2+\omega^2)^q+(-1)^{q-1}\gamma^q s^p. \tag{8.71}$$

通过发现代数方程 $\hat{P}(a_k)=0$ 的 $2q$ 个根，a_k，$k=1,2,\cdots,2q$.

8.3　过阻尼和欠阻尼的定义

当处理正常阻尼振子时，人们得到两种类型的解：过阻尼和欠阻尼. 这两种行为之间的互相转换发生在临界点 $\omega_{\rm c}$. 对于过阻尼运动，如果 $\langle x(t=0)\rangle>0$，那么任何时间 $\langle x(t)\rangle>0$，并且无振荡；对于欠阻尼情况，$\langle x(t)\rangle$ 震荡，并且穿过零线. 对于分数阶振子，我们注意到那里有不同类型的行为. 粒子短时存在一种震荡行为，要么穿过零线要么不穿过；要么单调衰减. 那么就像规则的阻尼振子那样，我们需要确定这些行为之间的过渡.

这里基于规则阻尼振子的不同定义，给出三种过阻尼和欠阻尼之间过渡的定义，在 $\alpha=1$ 时的结果与前者相同. ① 第一种选择是发现频率 $\omega_{\rm c}$，在其上 $\hat{P}(s)$ 的两个解相一致，即 $\hat{C}_x(s)$ 具有一对二阶极点；② 第二种考虑是寻找极小频率 ω_z，在其上解 $C_x(t)$ 穿过零线；③ 第三是考虑极小频率 ω_m，在其上 ${\rm d}C_x(t)/{\rm d}t$ 穿过零线 (即 $C_x(t)$ 不再是一个单调衰减函数). 对于正常阻尼振子，$\omega_{\rm c}=\omega_z=\omega_m$，但是在分数阶情况下，这一结论一般不再成立.

分数阶振子 $(0<\alpha<1)$ 和正常振子之间的另外不同是短时和长时之间的区分. 用多项式解以及方程 (8.49)，一般 α 下的渐进解为

$$C_x(t)\approx 1-\frac{1}{2}\omega^2t^2+\frac{\omega^2\gamma}{\Gamma(5-\alpha)}t^{4-\alpha},\quad t\to 0; \tag{8.72}$$

$$C_x(t)\approx\frac{\gamma}{\omega^2\Gamma(1-\alpha)}t^{-\alpha},\quad t\to\infty. \tag{8.73}$$

(8.73) 式仅在如下两个条件下不适用，第一个条件为

$$\left(\frac{\omega^2}{\gamma}\right)^{1/\alpha}t\gg 1; \tag{8.74}$$

第二个条件为

$$|a|t\gg 1, \tag{8.75}$$

其中，$|a|$ 为方程 (8.29) 中分母 $(s^2+\gamma s^\alpha+\omega^2)$ 的零根的绝对值，其也能从 $\hat{P}(s)=0$ 来发现. 数学上，第二个条件是 $\hat{C}_x(s)$ 的幂级数展开在 $s=0$ 附近收敛半径的幅度. 从方程 (8.73) 可见，$C_x(t)>0$，且对大 t，其按一个幂律衰减.

分数阶朗之万方程曾被用来描写一个单蛋白中荧光素–酪氨酸对的涨落 (其时间尺度为 1 毫秒 (ms) 到 10^2 秒) 和幂律衰减. 最近分子动力学模拟研究了一个单蛋白的施主–受主距离的涨落，对于 10^{-9} 秒的短时尺度，自关联函数的振荡被观测到了. 短时振荡和长时幂律衰减能被分数阶朗之万方程的解很好地描写.

1. 临界点 ω_{c}

在 $\alpha=\dfrac{1}{2}$ 情况下，我们有 $\hat{P}(s)=0$ 的四个解 $(a_k,\ k=1,\cdots,4)$. 在某一点两个解相同，我们称这个点 ω_{c} 为临界点. 当 $\omega=\omega_{\mathrm{c}}$，方程 (8.62) 的解 $C_x(t)$ 必须被修改，这是因为一般方法不是适合的. 对于 $\alpha=\dfrac{1}{2}$，临界频率为

$$\omega_{\mathrm{c}}=\frac{1}{2^{2/3}}\sqrt{(3/2)(1/2)^{1/3}}\gamma^{2/3}, \tag{8.76}$$

而方程 (8.62) 为

$$\begin{aligned}C_x(t)=&\sum_{m=0}^{3}\sum_{j=0}^{1}\tilde{B}_{mj}t^{j/2}\left\{\sum_{k=1}^{3}a_k^m A_k E_{1,1+j/2}(a_k t)+a_3^m\tilde{A}\right.\\&\left.\times\left[(t+ma_3^{-1})E_{1,1+j/2}(a_k t)-\frac{j}{2}tE_{1,2+j/2}(a_3 t)\right]\right\},\end{aligned} \tag{8.77}$$

其中，$a_1\neq a_2\neq a_3$，而 $a_4=a_3$ 为方程 (8.52)$\hat{P}(s)$ 的零根，$\tilde{B}_{mj}$ 从方程 (8.41) 中发现，A_1 和 A_2 由方程 (8.59) 定出，$A_3=A_1+A_2$，$\tilde{A}$ 由方程 (8.39) 定义.

需要说明的是临界点 ω_{c} 并不总是存在的. 下面将显示对任何奇数 q 和偶数 p 而言，无临界点 ω_{c} 存在.

数学上在临界点，方程 (8.38) 的分式中的系数 A_k 发散. 这个情况的发生是因为当两个 a_k 相同，则 $\hat{P}(s)$ 能写为 $(s-a_k)^2\hat{G}(s)$，这里 $\hat{G}(s)$ 是关于 s 的多项式，并且 $\hat{G}(a_k)\neq 0$，故

$$A_k=\frac{1}{\left[2(s-a_k)\hat{G}(s)+(s-a_k)^2\dfrac{\mathrm{d}\hat{G}(s)}{\mathrm{d}s}\right]\Bigg|_{s=a_k}} \tag{8.78}$$

发散. 为了发现如此临界点，以下两个条件必须被满足：

$$\hat{P}(s)=0,\quad \frac{\mathrm{d}\hat{P}(s)}{\mathrm{d}s}=0. \tag{8.79}$$

用方程 (8.71) 以及 $\alpha = p/q$ 和 $\omega = \omega_c$，

$$(s^2 + \omega_c^2)^q + (-1)^{q-1}\gamma^q s^p = 0, \tag{8.80}$$

$$2qs(s^2 + \omega_c^2)^{q-1} + p(-1)^{q-1}\gamma^q s^{p-1} = 0, \tag{8.81}$$

解这两个方程，发现

$$s = \pm\sqrt{\frac{\alpha}{2-\alpha}}\omega_c, \tag{8.82}$$

而 ω_c 必须满足

$$\omega_c = \frac{1}{2^{1/(2-\alpha)}}\sqrt{(2-\alpha)\alpha^{\alpha/(2-\alpha)}}\gamma^{1/(2-\alpha)}. \tag{8.83}$$

方程 (8.82) 和 (8.83) 仅对偶 q 或偶 $(q+p)(p/q$ 是不可约的) 情况下适用，这是因为对其他情况，方程 (8.80) 和 (8.81) 无解. 在方程 (8.82) 中，“+” 号出现在偶 q 奇 p 情况下，而 “−” 号出现在 q 和 p 均为奇数的情况下. 为看到这一点，将方程 (8.82) 代入方程 (8.80) 之中，于是必须有 $(-1)^{q-1} < 0$，所以 q 为偶数. 因为 p/q 不可约，而 p 是奇数. 相似地，方程 (8.82) 出现 “−” 号. 从这个讨论，人们就清楚为什么 $\alpha = 2/5$ 情况下，无临界频率 ω_c 的原因了.

2. 临界点 ω_z 和 ω_m

我们将相空间分成三个不同的区域. ① $0 < \omega < \omega_m$，$C_x(t)$ 单调衰减；② $\omega_m < \omega < \omega_c$，$C_x(t)$ 非单调衰减但总保持正值；③ $\omega_z < \omega$，非单调衰减区域，而 $C_x(t)$ 为负. 相似于方程 (8.83)，我们从量纲分析发现

$$\omega_z = k_z(\alpha)\gamma^{1/(2-\alpha)}, \tag{8.84}$$

$$\omega_m = k_m(\alpha)\gamma^{1/(2-\alpha)}, \tag{8.85}$$

其中，$k_z(\alpha)$ 和 $k_m(\alpha)$ 仅依赖于 α. 通过在不同的 α 和 $\gamma = 1$ 下解析研究方程 (8.83)，我们可以获得 $k_z(\alpha)$ 和 $k_m(\alpha)$. 相图的结果被画于图 8.4. 人们清楚地看到由方程 (8.83) 确定的 ω_z、ω_m 和 ω_c，三者仅在正常情况 $\alpha = 1$ 时是相同的.

一个关于 $k_m(\alpha)$ 有趣的行为能从图 8.4 中看出，一种相变的分类发生在 $\alpha \approx 0.4$ 附近. 我们利用上节发展的一般方法去探究 $\omega^{-2}\mathrm{d}C_x(t)/\mathrm{d}t$ 的行为，它的拉普拉斯变换为

$$\frac{1}{\omega^2}[s\hat{C}_x(s) - 1] = -\frac{1}{s^2 + \gamma s^\alpha + \omega^2}. \tag{8.86}$$

若 $\alpha \leqslant 0.4$，即使我们将 ω 降低到 10^{-7} $(\gamma = 1)$，也总是能观察到 $\mathrm{d}C_x(t)/\mathrm{d}t$ 穿过零，而对于 $\alpha \geqslant 0.404$，在一些有限的 ω 值之下，则没有穿过零. 所以我们得出结论：存在一个临界 α，$\alpha_c \approx 0.402 \pm 0.002$. 如果 $\alpha < \alpha_c$，即使谐振子频率 $\omega \to 0$，$C_x(t)$ 也

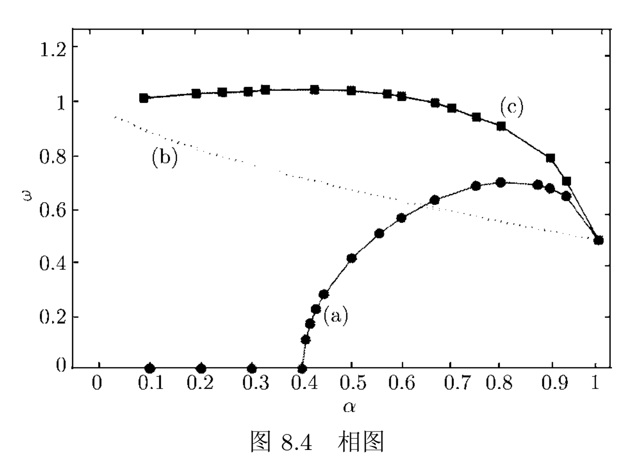


图 8.4 相图

(a) 单调衰减; (b) 无穿过零的非单调衰减; (c) 振荡穿过零

不单调衰减. 注意到还存在一些期待的行为: 当增加 ω，我们发现一个临界线，在其上，解是单调的且穿过零，一个线代表 $k_z(\alpha)$.

为了发现精确的 α_c 值，我们总是用到基于 Bernstein 理论的一个方法. 按照这个理论，当且仅当 $f(t)$ 为正时，那么对于任何整数 n，有

$$0 \leqslant (-1)^n \frac{\mathrm{d}^n \tilde{f}(s)}{\mathrm{d}s^n} \quad (s > 0), \tag{8.87}$$

其中，$\tilde{f}(s)$ 为 $f(t)$ 的拉普拉斯变换. 像以前那样，为了检查 $C_x(t)$ 的单调性，我们检查 $\omega^{-2}\mathrm{d}C_x(t)/\mathrm{d}t$ 是否穿过零? 或者当 $-\tilde{f}(s)$ 由方程 (8.86) 给出，在 Bernstein 理论知识内，检查 $(-1)^n\mathrm{d}^n\tilde{f}(s)/\mathrm{d}s^n$. 利用方程 (8.85) 的标度关系，我们令 $\gamma = 1$，容易检查当 $n = 0$ 和 $n = 1$，对于任何 $0 < \alpha < 1$，有 $(-1)^n\mathrm{d}^n\tilde{f}(s)/\mathrm{d}s^n > 0$, 但是对于 $n = 2$，

$$\begin{aligned}(-1)^n \frac{\mathrm{d}^n \tilde{f}(s)}{\mathrm{d}s^n} = \frac{1}{(s^2 + s^\alpha + \omega^2)^3}\{&6s^2 + (9\alpha - \alpha^2 - 2)s^\alpha \\ &+(\alpha^2 + \alpha)s^{2\alpha-2} - \omega^2[2 + \alpha(\alpha - 1)s^{\alpha-2}]\}.\end{aligned} \tag{8.88}$$

在 $\omega \to 0$ 极限下，人们容易显示：当 $\alpha \leqslant 0.07$，方程 (8.88) 有负值. 所以当 $n = 2$，我们有一个 α 的上边界，$\alpha^{(2)} \approx 0.071$，这里对于任何 $\alpha < \alpha^{(2)}$，$\mathrm{d}C_x(t)/\mathrm{d}t$ 穿过零线，弛豫是非单调的. 如果人们希望增加这个上边界的精确性，那么就要检查对高阶 n 值，即 $(-1)^n\mathrm{d}^n\tilde{f}(s)/\mathrm{d}s^n$ 的行为. 对任何 n，我们定义一个上确界值 $\alpha^{(n)}$. 用 Mathematica，我们能从事 n 的更高值，去发现对各种 ω 的上确界 $\alpha^{(n)}$.

对不同的 ω，上确界作为 n 的函数；可以看到，随着 n 的增加，上界 $\alpha^{(n)}$ 收敛于某些小于 1 的值. 例如, 对于 $\omega = 0$，$n = 150$ 时，$\alpha^{(150)} = 0.394$，与 $\alpha_c \approx 0.402$ 比较知，近似方案是相当好的.

3. 笼子效应

对这种有趣结果的一个解释是基于笼子效应. 对于小 α，由媒介诱发的摩擦力并不仅仅是放慢粒子，用时也导致粒子发展一种拍击运动. 为了看到这个，考虑方程 (8.30) 在 $\alpha \to 0$ 的极限，

$$m\ddot{C}_x(t) + m\gamma[\dot{C}_x(t) - C_x(0)] + m\omega^2 C_x(t) = 0, \tag{8.89}$$

这里，从方程 (8.26) 知 $C_x(0) = 1$. 方程 (8.89) 描写了简谐运动，摩擦强度 γ 在 $\alpha \to 0$ 极限下得出一个弹性简谐力. 在这个意义上，媒体起到了束缚粒子的作用，防止扩散但产生振荡. 在相反的 $\alpha \to 1$ 的极限下，有

$$m\ddot{C}_x(t) + m\gamma\dot{C}_x(t) + m\omega^2 x = 0, \tag{8.90}$$

这就是通常的阻尼振子. 所以，从方程 (8.89) 出发，即使 $\omega \to 0$，一种振荡行为也被展现. 这能用一个粒子在一个由周围粒子形成的笼子里的拍击运动来解释. 这种行为表明了小 α 的非单调振荡解. α_{c} 使得正常摩擦 ($\alpha \to 1$) 和弹性摩擦 ($\alpha \to 0$) 之间存在一种非光滑过渡，这是一个奇异的结果.

对于足够小的 α，存在笼子效应，这不仅对关联函数，而且对其他量也能被观测到. 下一节对于复响应率而言，存在一种振荡模，如此模出现在足够高的频率和足够低的 α. 存在一个振荡模与关于关联函数的方程 (8.89) 的描写相一致，说明了如此振荡运动不是由于被观测量的特殊性质，而是因为粒子与媒体的复杂相互作用，体现在摩擦项.

8.4　对一个外部信号的响应

本节探究分数阶朗之万方程对一个与外部时间有关的力的响应. 当外场频率与系统自然频率相匹配时，一个系统对一个与振荡时间有关的场的响应自然导致共振现象. 欠扩散系统对如此一个时间场的响应是一个重要研究的课题. 实际上，分数阶导数方法运用于欠扩散将导致反常响应函数，这已在许多系统中被发现. 下面将探究有或无简谐势时分数阶朗之万方程的响应，也将探讨复响应率的虚部的行为，即介电损失.

出发点为方程 (8.24)，其中取 $F(x,t) = F_0\cos(\varOmega t) - m\omega^2 x$，完成平均，有

$$\langle \ddot{x} \rangle + \gamma \frac{\mathrm{d}^\alpha \langle x \rangle}{\mathrm{d}t^\alpha} + \omega^2 \langle x \rangle = \frac{F_0}{m}\cos(\varOmega t) \tag{8.91}$$

长时间区域的解是

$$\langle x(t) \rangle \sim \frac{F_0}{m}\int_0^t \cos[\varOmega(t - t')]h(t')\mathrm{d}t', \tag{8.92}$$

其中的 $h(t)$ 将很快地被确定. 方程 (8.92) 被写作

$$\langle x(t)\rangle = R(\Omega)\cos[\Omega t+\theta(\Omega)], \quad t\to\infty, \tag{8.93}$$

响应函数 $R(\Omega)$ 和相移 $\theta(\Omega)$ 由复响应率获得

$$\chi(\Omega)=\chi'(\Omega)+\mathrm{i}\chi''(\Omega)=\hat{h}(-\mathrm{i}\Omega), \tag{8.94}$$

其中，$\chi'(\Omega)$和$\chi''(\Omega)$分别为响应率的实部和虚部，而且 $\hat{h}(-\mathrm{i}\Omega)=\int_0^\infty \exp(\mathrm{i}\Omega t)h(t)\mathrm{d}t$. 响应为

$$R(\Omega)=|\chi(\Omega)|, \tag{8.95}$$

相移为

$$\theta(\Omega)=\arctan\left[-\frac{\chi''(\Omega)}{\chi'(\Omega)}\right]. \tag{8.96}$$

1. 无界粒子

对于无界粒子，可在方程 (8.91) 中令 $\omega=0$，用方程 (8.92)，获得

$$\chi(\Omega)=\hat{h}(-\mathrm{i}\Omega)=\frac{1}{\gamma(-\mathrm{i}\Omega)^\alpha-\Omega^2}. \tag{8.97}$$

用 (8.95) 式，我们能获得任何 $0<\alpha<1$ 的 $R(\Omega)$ 的显式. 对于正常扩散 $\alpha=1$，响应 $R(\Omega)$ 是 Ω 的衰减函数，无共振发生；但是对于 $0<\alpha<1$，图像就十分不同了. 在欠扩散情况，响应 $R(\Omega)$ 总是一个单调衰减函数，并且能获得一个极大，即共振，即使对自由运动. 从图 8.5 中可见，对于足够小的 α，$R(\Omega)$ 存在共振，它并不依靠除了 α 以外的其他参数.

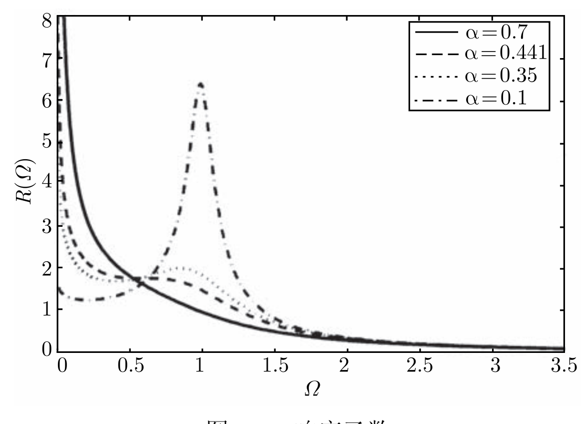


图 8.5　响应函数

写出响应 $R(\Omega)$ 的显式，有

$$R(\varOmega)=\frac{1}{\sqrt{\varOmega^4+\gamma^2\varOmega^{2\alpha}-2\gamma\varOmega^{2+\alpha}\cos(\pi\alpha/2)}}. \tag{8.98}$$

寻找 $\mathrm{d}R(\varOmega)/\mathrm{d}\varOmega=0$ 的解，所以

$$4\varOmega_{\mathrm{R}}^3+2\alpha\gamma^2\varOmega_{\mathrm{R}}^{2\alpha-1}-2(\alpha+2)\gamma\varOmega_{\mathrm{R}}^{\alpha+1}\cos\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right)=0, \tag{8.99}$$

其解为

$$\frac{\gamma}{\varOmega_{\mathrm{R}}^{2-\alpha}}=\frac{1}{2\alpha}\left[(\alpha+2)\cos\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right)\pm\sqrt{(\alpha+2)^2\cos^2\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right)-8\alpha}\right], \tag{8.100}$$

这里，$\varOmega_{\mathrm{R}}$ 就是共振频率. 当 (8.100) 式右端的判别式大于零，将存在共振. 这个判别式不依靠于 γ，当 $\alpha\leqslant\alpha_{\mathrm{R}}=0.441021$，其总是正的，$\alpha_{\mathrm{R}}$ 满足关系式

$$(\alpha_{\mathrm{R}}+2)^2\cos^2\left(\frac{\pi\alpha_{\mathrm{R}}}{2}\right)-8\alpha_{\mathrm{R}}=0. \tag{8.101}$$

当 $\alpha>\alpha_{\mathrm{R}}$，无共振发现；而对于 $\alpha<\alpha_{\mathrm{R}}$，总有一个 $\varOmega_{\mathrm{R}}>0$，这时响应将存在一个共振. 一个自由粒子分数阶朗之万方程的共振结果是非预期的，但是符合于本章的小 α 摩擦力，由于笼子效应可作为一个弹性力的描写.

2. 简谐束缚粒子

现在处理简谐势中分数阶朗之万方程，即分数阶振子的响应函数. 从方程 (8.91) 出发，令初始条件为 $x_0=v_0=0$. 在长时间极限 $t\to\infty$，我们再次获得 $\langle x\rangle=R(\varOmega)\cos[\varOmega t+\theta(\varOmega)]$，其中 $R(\varOmega)$ 和 $\theta(\varOmega)$ 由方程 (8.95) 和 (8.96) 确定. 复响应率为

$$\chi(\varOmega)=\frac{1}{(\omega^2-\varOmega^2)+\gamma(-\mathrm{i}\varOmega)^\alpha}. \tag{8.102}$$

对于 $\alpha=1$，(8.102) 式退化为正常阻尼振子的复响应率.

我们感兴趣的是外场响应的共振点，即 $R(\varOmega)$ 的极大点，其一般依赖于 $\varOmega$、γ 和 ω. 对于正常振子而言，有一个共振条件：$\omega\geqslant\gamma/\sqrt{2}$. 若这个条件不被满足，则 $R(\varOmega)$ 是一个 $\varOmega$ 的单调减函数. 从方程 (8.95) 和 (8.102) 知

$$R(\varOmega)=\frac{1}{\sqrt{(\omega^2-\varOmega^2)^2+\gamma^2\varOmega^{2\alpha}+2(\omega^2-\varOmega^2)\gamma\varOmega^\alpha\cos(\pi\alpha/2)}}, \tag{8.103}$$

并且用 $\mathrm{d}R(\varOmega)/\mathrm{d}\varOmega=0$，我们发现

$$2\alpha\left(\frac{\gamma}{\varOmega_{\mathrm{R}}^{2-\alpha}}\right)^2+\left[2\alpha\left(\frac{\omega^2}{\varOmega_{\mathrm{R}}^2}-1\right)-4\right]\cos\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right)\frac{\gamma}{\varOmega_{\mathrm{R}}^{2-\alpha}}-4\left(\frac{\omega^2}{\varOmega_{\mathrm{R}}^2}-1\right)=0. \tag{8.104}$$

考查方程 (8.104)，导致两个发现，这被完成在图 8.5. 第一个发现是存在由方程 (8.101) 确定的某些临界值 $\alpha_{\rm R}$，对于任何 $\alpha < \alpha_{\rm R}$，总是存在一个特殊的 $\Omega_{\rm R}$，系统发生共振. 第二个发现是在 $\alpha_{\rm R}$ 以上，共振相和非共振相之间存在一个边界. 当 $\alpha < \alpha_{\rm R}$，无共振相存在. 这个边界由下列关系确定：

$$\frac{\omega}{\gamma^{1/(2-\alpha)}} = g(\alpha), \tag{8.105}$$

函数 $g(\alpha)$ 可给出解析表示式

$$g(\alpha) = c(\alpha)^{-1/(2-\alpha)}\sqrt{\frac{c(\alpha)^2 - c(\alpha)\cos(\pi\alpha/2)(1+2/\alpha)+2/\alpha}{2/\alpha - c(\alpha)\cos(\pi\alpha/2)}}. \tag{8.106}$$

从中可以看出：如果 $\omega/\gamma^{1/(2-\alpha)} > g(\alpha)$，一个共振相被获得，而非共振相满足 $\omega/\gamma^{1/(2-\alpha)} < g(\alpha)$. 在 $\alpha \to 1$ 的极限下，边界趋于正常阻尼振子的值 $1/\sqrt{2}$. 临界点 $\alpha_{\rm R}$ 附近，$g(\alpha)$ 按一个指数为 1/2 的幂律下降到零，

$$g(\alpha) \propto (\alpha - \alpha_{\rm R})^{1/2}, \quad \alpha \to \alpha_{\rm R}. \tag{8.107}$$

自由粒子和简谐束缚粒子存在相同的临界值 $\alpha_{\rm R}$，这能从相图 8.4 来理解. 选择直线 $\omega = 0$，这表示一个自由粒子情形，沿着这条线，从共振相出发，我们将穿过 $\alpha = \alpha_{\rm R}$ 到达非共振相. 一般来说，对任何外力，将得到相同的临界值 $\alpha_{\rm R}$，这是因为这个量由粒子周围媒介的内部性质，即分数阶朗之万方程的摩擦部分所确定. 原因在于关联 $C_x(t)$ 的非单调衰减和共振的存在，两者之间具有强烈的关联性. 小 α 存在一种共振，而以前的研究在过阻尼极限下，在此 α 也不存在共振的结果. 目前的行为是由于笼子效应造成的.

3. 复响应率

关于复响应率的方程 (8.102) 能写出如下的形式：

$$\begin{aligned}\chi(\Omega) =& \chi'(\Omega) + {\rm i}\chi''(\Omega)\\ =& \frac{(\omega^2-\Omega^2)+\gamma\Omega^\alpha\cos(\pi\alpha/2)}{(\omega^2-\Omega^2)^2+\gamma^2\Omega^{2\alpha}+2\gamma(\omega^2-\Omega^2)\Omega^\alpha\cos(\pi\alpha/2)}\\ &+{\rm i}\frac{\gamma\Omega^\alpha\sin(\pi\alpha/2)}{(\omega^2-\Omega^2)^2+\gamma^2\Omega^{2\alpha}+2\gamma(\omega^2-\Omega^2)\Omega^\alpha\cos(\pi\alpha/2)}.\end{aligned} \tag{8.108}$$

对许多系统来说，响应率的实部和虚部是实验可测量的，所以人们有兴趣探究分数阶朗之万方程框架下它们的行为. 在这个意义上，我们将讨论虚部的行为，其被称为损失. 我们观察到对不同的 α，$\chi''(\Omega)$ 的有趣行为：不仅像正常振荡所期待的有一个峰，而且对于某些 α 观测到双峰. 超冷液体的损失的双峰机制和蛋白质解是一个著名的现象，通常基于模耦合理论来处理. 我们针对 $\chi''(\Omega)$ 的行为而定义两

个相，同时还要发现 $\chi''(\Omega)$ 的相图. 第一个相是 $\chi''(\Omega)$ 仅有一个峰，即单峰相；第二个相为双峰相.

我们讨论了 $\mathrm{d}\chi''(\Omega)/\mathrm{d}\Omega$ 的行为，并且寻找单峰和双峰的边界. 两相之间的边界由解析函数 $\tilde{g}_1(\alpha)$ 和 $\tilde{g}_2(\alpha)$ 给出，它们仅依赖于 α. 两个临界 α 由如此的相图所发现，第一个是 $\alpha_{\chi_1}=0.527$，边界 $\tilde{g}_1(\alpha)$ 下降到零，第二个为 $\alpha_{\chi_2}=0.707$；在这点，$\tilde{g}_1(\alpha)$ 和 $\tilde{g}_2(\alpha)$ 相同 (见图 8.4). 注意到临近 α_{χ_1}，$\tilde{g}_1(\alpha)$ 的行为是 $\tilde{g}_1(\alpha)\propto(\alpha-\alpha_{\chi_2})^{1/2}$.

双峰现象的解释与足够小 α 时存在共振以及关联函数不出现单调衰减相是在相同意义下的. 相同的原因是：对足够小的 α 而言，摩擦成为一个弹性力，振荡被埋入系统. 复响应率被画在图 8.6. 对于 $\alpha=0.8$ 的系统，其行为非常相似于正常阻尼振子，一个德拜模型，对足够小 $\omega/\gamma^{1/(2-\alpha)}$(大摩擦)，即一种弛豫的单调行为；对于一个大 $\omega/\gamma^{1/(2-\alpha)}$ 值 (小摩擦)，图 8.6(d)，即一种弛豫的振荡行为. 这两种模型的正常复响应率对应于系统存在单一特征频率，或者，如果与关联相联系，则对应单一的时间尺度. 对于小 α，例如，在图 8.6(a) 的 $\alpha=0.1$，我们看到这两种类型正常响应率的共存. 图 8.6(a) 的右边对应于德拜型，一个非单调降低过程; 左边为 Van Vleck-Weisskopf-Friöhlich 型，其显示高度振荡行为，即使当 γ 和 ω 与图 8.6(c) 相同的情况下. 等效地，对于小 α，有两个系统特征频率；较低者对应于单调衰减，较高者为一个振荡过程. 对于中间的 α，有一些混合行为，见图 8.6(b). 图 8.6(a) 的这种振荡行为是笼子效应的表现，其能用周围粒子的拍击运动来解释，也是分数阶朗之万方程中的摩擦力所特有的.

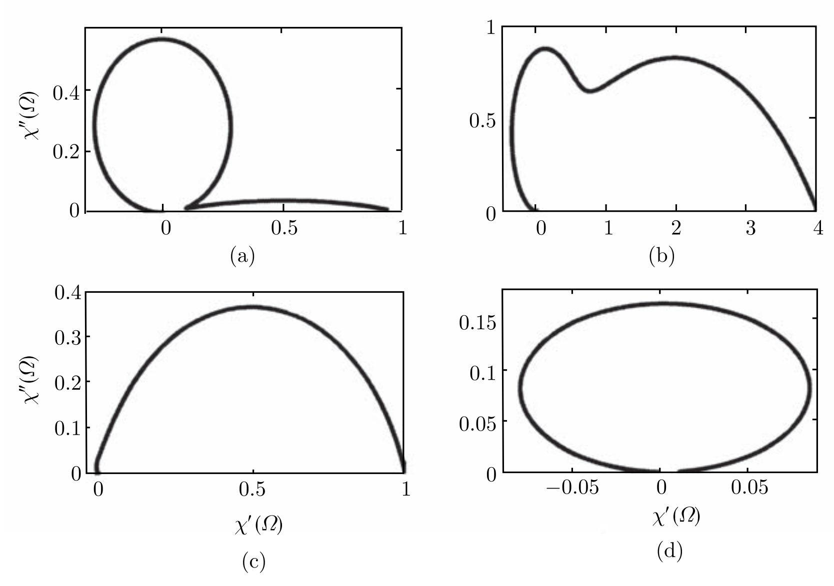


图 8.6 复响应率

小结

具有幂律记忆核及 $0 < \alpha < 1$ 的分数阶朗之万方程是一个描写反常欠扩散行为的随机框架. 这个方程用分数阶导数来表示，以致提供了一个非整数阶导数计算发挥作用的一种物理机制的例子. 一个描写关联函数的分数阶微分方程的解是基于规则多项式的根来完成的.

对于 $\alpha \neq 1$ 的情况，没有唯一的方式来定义过阻尼和欠阻尼运动. 因此，提出了三个转变频率的定义，即 $\omega_{\rm c}$、ω_m 和 ω_z. 我们观察到对于一个临界值 $\alpha = \alpha_{\rm c} \approx 0.402$，存在一种相变，这里如果 $\alpha < \alpha_{\rm c}$，$C_x(t)$ 对于任何 $\omega > 0$ 均不单调衰减. 物理上能用笼子效应来解释，也就是粒子在其周围粒子形成的笼子里的一种拍击运动.

基于复响应率 $\chi(\Omega)$，计算了对一个时间有关场的响应，相似的临界 α 也被发现. 特别地，若 $\alpha < \alpha_{\rm R} = 0.441$，则对于一个合适的 Ω 以及任何 γ 和 ω，系统将总是处于共振情况，即使在自由粒子情况 $(\omega = 0)$. 对于损失，基于复响应率的虚部，$\chi''(\Omega)$，定义两个相：① 单峰相，这时复响应率像规则情况一样仅有一个极大；② 双峰相，复响应率有两个极大，故可以完成一个相图. 对于 $\chi''(\Omega)$，有两个临界指数 $\alpha_{\chi_1} = 0.527$ 和 $\alpha_{\chi_2} = 0.707$，这些指数定义了相图的边界.

总之，临界指数：$\alpha_{\rm c}$、$\alpha_{\rm R}$、α_{χ_1} 和 α_{χ_2} 使分数阶动力学系统的行为急剧地转变. 故这些临界指数在描写反常统计动力学中是重要的.

8.5 金融市场的分数阶朗之万记忆模型

众所周知金融时间序列是不确定，但也不是非常无结构的. 我们知道利润的一些非线性函数，例如，挥发性，具有长程关联性，这就意味着金融时间序列的随机过程具有长程记忆. 目前，尚缺乏一个令人满足的价格动力学的理论模型，不过，可以基于分数阶朗之万方程来描写金融市场的记忆效应.

8.5.1 利润

在金融中，挥发是用来量度一个资产价格涨落的大小和频率的，以至于对应的概率分布函数的宽度 σ 就是一个自然计算的目标. 令在时间 t 的利润为

$$g(t) = \ln\left[\frac{p(t+\Delta t)}{p(t)}\right], \tag{8.109}$$

其中，$p(t)$ 系资产在时间 t 的价格，Δt 是价格被抽样的间隔. 时间 t 的挥发被定义为 $g(t)$ 的绝对值对时间窗口 $T = n\Delta t$ 的平均:

$$v_T(t) = \frac{1}{n}\sum_{t'=t}^{t+n-1} |g(t')|. \tag{8.110}$$

然而，一个随机变量的自关联函数仅对它的线性暂态关联敏感，此关联的快速指数衰减并不排除在数据中有更加微妙的非线性长程关联的可能性.

市场活动是一个随机过程，在统计物理中有两种途径来描写随机现象. 其中之一是用动力学变量，即朗之万方法. 如果微观和宏观时间尺度之间存在着可分离性，那么就可以用随机微分方程.

8.5.2 分数阶无规行走

为了对复杂、非微分现象中的长期限记忆模型化，我们需要推广微分的概念到包括分数阶. 基于与无规行走模型相同的精神，长时间记忆的模型提供给人们对相当复杂过程的一个概念上简单的数学表示.

定义离散漂移算符 B，其作用在一个离散数据 Y 上，将脚标指数漂移一个早先时间单位

$$BY_j = Y_{j-1}, \tag{8.111}$$

利用漂移算符，一个简单的随机行走能被写作

$$(1-B)Y_j = \xi_j, \tag{8.112}$$

这里，每个步长具有 ξ_j 值. 我们通过考虑分数阶微分方程而推广随机行走

$$(1-B)^{\epsilon}Y_j = \xi_j, \tag{8.113}$$

其中, ϵ 不是一个整数.

现在找出方程 (8.113) 的合适解，表示为

$$Y_j = (1-B)^{-\epsilon}\xi, \tag{8.114}$$

基于二项式展开，对于 $|\epsilon|<1$ 情况，有

$$Y_j = \sum_{k=0}^{\infty}\begin{pmatrix} -\epsilon \\ k \end{pmatrix}(-1)^k B^k \xi_j = \sum_{k=0}^{\infty}\begin{pmatrix} -\epsilon \\ k \end{pmatrix}(-1)^k \xi_{j-k}. \tag{8.115}$$

方程 (8.115) 与标准的无规行走的不同之处在于记忆扩展到当前时刻以前的无限远. 在通常的无规行走中，ϵ 是一个整数，由于 Γ 函数有简单的极性，二项式系数经过 $\epsilon+1$ 时间步后消失，可将求和切断. 在目前的情况下，这没有发生，用 Γ 函数的一些等式，我们有

$$\begin{pmatrix} -\epsilon \\ k \end{pmatrix} = \frac{\Gamma(1-\epsilon)}{\Gamma(k+1)\Gamma(-\epsilon-k+1)} = (-1)^k\frac{\Gamma(k+\epsilon)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\epsilon)}. \tag{8.116}$$

分数阶微分方程 (8.113) 的解由 (8.115) 式给出，其明显地将系统当前的响应 Y_j，与发生在先前无限远的涨落 $(k\to\infty)$ ξ_{j-k} 联系起来. 那些涨落影响的大小由

二项式系数来衡量，因为它们刻画了涨落对系统的影响程度. 我们用 Γ 函数的斯特林近似估计系统与环境的耦合强度

$$\frac{\Gamma(k+\epsilon)}{\Gamma(k+\beta)} \propto k^{\epsilon-\beta}, \quad k \gg \epsilon, \beta, \tag{8.117}$$

所以，当 $k \to \infty$，因为 $k \gg |\epsilon|$，则方程 (8.115) 中的耦合强度成为

$$(-1)^k \begin{pmatrix} -\epsilon \\ k \end{pmatrix} \propto \frac{k^{\epsilon-1}}{\Gamma(\epsilon)}, \tag{8.118}$$

只要 $|\epsilon| < 1$，那么方程 (8.115) 的权重随时间增长就以倒幂律形式降低.

因为方程 (8.115) 是线性的，若 ξ 涨落的统计被假设是高斯的，则分数阶微分方程 (8.115) 所描写的过程的统计也是高斯的. 然而，倘若白噪声 ξ 的谱是平的，则 Y 的谱是一个倒幂律，就刻画了分数阶随机过程. 从这些分析结果，我们得出结论：由分数阶微分随机方程所定义的过程属于分数阶高斯噪声. 令 $\epsilon = H - \dfrac{1}{2}$，那么谱写作

$$S_Y(\omega) \approx \frac{1}{\omega^{2H-1}}, \quad \omega \to 0. \tag{8.119}$$

故描写过程演化的分数阶动力学的必然结果就是长时间记忆.

8.5.3　分数阶随机方程

让我们考虑分数阶微分随机方程 (8.113) 的连续形式，

$${}_0D_t^{\alpha}[Y(t)] = \xi(t); \quad 0 < \alpha \leqslant 1, \tag{8.120}$$

这个分数阶随机方程的逆表示为

$$Y_\alpha(t) \equiv {}_0D_t^{-\alpha}[\xi(t)], \tag{8.121}$$

基于黎曼–刘维尔分数阶积分，上式能被写成

$$Y_\alpha(t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{\xi(\tau)}{(t-\tau)^{1-\alpha}} \mathrm{d}\tau. \tag{8.122}$$

用幂律指标 $H = \alpha - \dfrac{1}{2}$，我们将方程 (8.122) 重新写作

$$Y_H(t) = \frac{1}{\Gamma(H+1/2)} \int_0^t (t-\tau)^{H-1/2} \xi(\tau) \mathrm{d}\tau, \tag{8.123}$$

这是一种连续的分数阶随机微分方程的选择，但与分数阶布朗运动不同.

因为积分算符 (8.122) 式是线性的，所以解的分布函数形式与噪声的一样，如果 $\xi(t)$ 是 δ 关联高斯过程，那么系统的响应也将是高斯的，方差是

$$\sigma_H^2(t) = \sigma_H^2 t^{2H}, \tag{8.124}$$

其中，

$$\sigma_H^2 \equiv \frac{\langle \xi^2 \rangle}{2H\Gamma(H+1/2)^2}. \tag{8.125}$$

上述由一个维纳过程驱动的分数阶随机微分方程的解是高斯的，所具有的方差以幂律形式随时间增长. 当 $H > \dfrac{1}{2}$，涨落的扩散快于正常扩散过程；当 $H < \dfrac{1}{2}$，涨落的扩散慢于正常扩散过程. 所以说，分数阶积分将维纳过程转换成一个反常扩散过程. 注意到 $H = \alpha - \dfrac{1}{2}$，而 $0 < \alpha \leqslant 1$，所以，一个分数阶微分随机方程的结果总是欠扩散的.

8.6　分数阶统计

用一个正常扩散的简单无规行走来对复杂系统进行模型化将导致高斯统计以及方均位移线性随时间增长. 大部分复杂现象的描写将用到分数阶导数，那么一个具有长时记忆的随机过程能由一个维纳过程的分数阶积分来产生. 我们已经看到如此过程还是高斯统计，但它们具有倒幂律的谱，所以系统的响应是一个具有分形维 $D = 2 - H$ 的函数.

现在将注意力从无规行走转移到不可微分，或更精确地说是分数阶微分和随机现象. 描写一个单位质量粒子的一维布朗运动的朗之万方程：

$$\frac{\mathrm{d}v(t)}{\mathrm{d}t} + \lambda v(t) = \xi(t), \tag{8.126}$$

这里 λ 为一个耗散参量，这个方程经常被当做一个奥恩斯坦–乌伦贝克过程. 方程 (8.126) 最合适的意义并不是作为一个微分方程，而是作为一个积分方程：

$$\mathrm{d}v(t) + \lambda v(t)\mathrm{d}t = \mathrm{d}B(t), \tag{8.127}$$

其中，$\mathrm{d}B(t)$ 是一个微分维纳过程. 我们推广方程 (8.127) 使之包括非局域影响，这种推广经常发生在聚合物、黏滞性弹性媒介中. 在经济背景下，那些影响的类似体是战争、失业、通货膨胀、政治丑闻等.

8.6.1　分数阶朗之万方程的各种解

注意到朗之万方程 (8.127) 在特征上是唯象的，那么在具有记忆的物理现象中，有理由用一个速度的分数阶导数去代替牛顿第二定律中的力. 物理上，这种替代意味着力是定义在点的一组分形上. 为了保证这个模型在物理上合适，分数阶力应该包括初始速度；另外，耗散参量要有合适的标度单位. 所以，分数阶朗之万方程写作

$$ {}_0D_t^\alpha[v(t)] - v_0\frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = -\lambda^\alpha v(t) + \xi(t), \quad 1 \geqslant \alpha > 0, \tag{8.128} $$

其中，$\xi(t)$ 仍然选为维纳过程，过程的初始值为 v_0. 现在的问题是：方程 (8.128) 是否是通常的朗之万方程 (8.126) 的合适推广？它能够提供金融市场活动的瞬间演化的动力学模型吗？

这里，我们承认以上关于金融市场的物理观点，写出在一个给定时间间隔的交易归一化数 $n(t)$ 的分数阶动力学方程. 当然在这种定义下，初始值问题消失，我们首先看方程 (8.128) 所有可能的解.

1. 随机分数阶微分方程 —— 无耗散

在解完全的分数阶朗之万方程 (8.128) 之前，我们着眼于这个方程的一些简单的情形. 其中之一是无耗散，即

$$ {}_0D_t^\alpha[v(t)] - v_0\frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} = \xi(t). \tag{8.129} $$

先忽视对于市场变量初始值的影响，$v_0 = 0$. 方程 (8.129) 的解能用一个积分算符写成

$$ v(t) - v_0 = {}_0D_t^{-\alpha}[\xi(t)]. \tag{8.130} $$

当 $\xi(t)$ 是一个维纳过程，我们知道这个方程解的统计是高斯的，并且解的谱是一个倒幂律. 但是，无法明确地计算系统响应的关联性质. 现用黎曼–刘维尔分数阶积分的形式特性求出两次关联函数，

$$ \langle[v(t_1)-v_0][v(t_2)-v_0]\rangle = \frac{1}{\Gamma(\alpha)^2}\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_1'\int_0^{t_2}\mathrm{d}t_2'\frac{\langle\xi(t_1')\xi(t_2')\rangle}{(t_1-t_1')^{1-\alpha}(t_2-t_2')^{1-\alpha}}, \tag{8.131} $$

这里涨落被假设成在时间域上为 δ 函数的关联，

$$ \langle\xi(t_1')\xi(t_2')\rangle = 2D\delta(t_1'-t_2'). \tag{8.132} $$

在 (8.131) 式中，对时间 t_1 和 t_2 的积分是完全对称的，不过我们知道 δ 函数将限制积分对两个时间中较早一个进行，这是因为在那里两者能相当. 所以，引入记号 $t_>$ 为较大时间，$t_<$ 为较小时间，并且在积分 (8.131) 式中实现对 δ 函数的一重较大时间的积分，有

$$ \langle[v(t_>)-v_0][v(t_<)-v_0]\rangle = \frac{4D}{\Gamma(\alpha)^2}\int_0^{t_<}\frac{1}{(t_>-t)^{\alpha-1}(t_<-t)^{\alpha-1}}\mathrm{d}t \tag{8.133} $$

引入归一化变量 $\zeta = t/t_<$，经过一些代数运算，获得

$$ \langle[v(t_>)-v_0][v(t_<)-v_0]\rangle = \frac{4Dt_>^{\alpha-1}t_<^\alpha}{\Gamma(\alpha)^2}\int_0^t\mathrm{d}\zeta\left(1-\frac{t_<}{t_>}\zeta\right)^{\alpha-1}(1-\zeta)^{\alpha-1}. \tag{8.134} $$

用下列的超几何函数的积分表示

$$
{}_2F_1(a;b;c;z)=\frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)}\int_0^1 \mathrm{d}\zeta\zeta^{a-1}(1-\zeta)^{c-a-1}(1-\zeta z)^{-b}, \tag{8.135}
$$

其中，$\mathrm{Re}c>\mathrm{Re}a>0$，而用方程 (8.134) 中的对应项等于方程 (8.135) 中的系数，我们获得

$$
\langle[v(t_>)-v_0][v(t_<)-v_0]\rangle=\frac{4Dt_>^{\alpha-1}t_<^{\alpha}}{\alpha\Gamma(\alpha)^2}F\left(1;1-\alpha;1+\alpha;\frac{t_<}{t_>}\right), \tag{8.136}
$$

这里我们已经略去了超几何函数的角标，并且当 $t_>=t_<$，超几何函数的表示仅对 $\alpha>0.5$ 适用. 注意方程 (8.129) 解的统计是非稳定的，其原因是关联函数分离地依靠 $t_>$ 和 $t_<$，而不是仅仅依靠差 $t_>-t_<$.

如果 $\xi(t)$ 涨落被假设具有高斯分布，那么从微分产物的线性特性，我们知道方程 (8.129) 描写的分数阶动力学过程也将是高斯的. 另外，从 Gopikrishnan 等的数据分析知道，动力学金融变量并没有高斯统计. 事实上，市场行为有一个幂律尾分布密度函数.

所以，现在不假设涨落 ξ 是高斯的，不过假设它们有一个 δ 关联. 在这种方式下，把交易的归一化数目看成系统变量，并且引入归一化变量 $z=t_</t_>$，得到

$$
\langle n(t_>)n(t_<)\rangle=\frac{4Dt_>^{2\alpha-1}}{\alpha\Gamma(\alpha)^2}z^{\alpha}F(1;1-\alpha;1+\alpha;z). \tag{8.137}
$$

当然，能用方程 (8.136) 写出在时刻 $t=t_>=t_<$ 的二次矩

$$
\langle n(t)^2\rangle=\frac{4Dt^{2\alpha-1}}{\alpha\Gamma(\alpha)^2}F(1;1-\alpha;1+\alpha;1), \tag{8.138}
$$

同时利用

$$
F(a;b;c;1)=\frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}, \tag{8.139}
$$

倘若 $\mathrm{Re}c>\mathrm{Re}(a+b)$，并且 c 是一个非正的整数，获得二次矩

$$
\langle n(t)^2\rangle=\frac{4D}{(2\alpha-1)\Gamma(\alpha)^2}t^{2\alpha-1}. \tag{8.140}
$$

如果令 $H=\alpha-\dfrac{1}{2}$，那么 (8.140) 式符合于反常扩散的结果. 但是，为了满足超几何函数的条件，这种等同性仅对 $1>\alpha\geqslant 1/2$ 可以做. 在这种情况下，我们有 $\dfrac{1}{2}\geqslant H\geqslant 0$，对应于一个反持续过程. 对不同的分数阶微分指标 α，自关联函数作为归一化变量的函数，

$$C_\alpha(t_>,t_<)\equiv\frac{\langle n(t_>)n(t_<)\rangle}{\langle n(t_>)^2\rangle}=z^\alpha\frac{F(1;1-\alpha;1+\alpha;z)}{F(1;1-\alpha;1+\alpha;1)}. \tag{8.141}$$

(9.141) 式有一个占优势的幂律形式，但具有不同的斜率，以致于我们能写出经验方程:

$$C_\alpha(z)\propto z^\mu. \tag{8.142}$$

指数 μ 是一个分数阶导数参数 α 的函数，当 $0.6\leqslant\alpha\leqslant0.9$ 时，$\mu\geqslant1.5$.

然而，已处理和发表的数据可以直接与标度结果 (8.142) 式相比较. 所以在自关联函数中引入 $t_<=t_>-\tau$ 和 $t=t_>$，画出结果函数随归一化时间分离变量 τ/t 的变化. 我们发现

$$C_\alpha(\tau,t)=\left(1-\frac{\tau}{t}\right)^\alpha\frac{F\left(1;1-\alpha;1+\alpha;1-\frac{\tau}{t}\right)}{F(1;1-\alpha;1+\alpha;1)}\simeq\frac{A(\alpha)}{(1+\tau/t)^{B(\alpha)}}, \tag{8.143}$$

其中，经验参数 A 和 B 是分数阶导数指标 α 的函数，能由最小二乘法固定自关联函数的唯象方程来获得.

2. 分数阶微分方程 —— 无涨落

考查均匀分数阶微分方程的解，一旦理解这种解，就可以考虑非均匀情况. 均匀分数阶微分方程不包括 “热” 涨落，

$$ {}_0D_t^\alpha[v(t)]-v_0\frac{t^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}=-\lambda^\alpha v(t). \tag{8.144}$$

方程 (8.144) 在数学上是容易确定的，但是，它的物理意义是什么呢? 由统计物理，我们知道在方程中的涨落与耗散密切相关，事实上它们来自同一起源. 这就是为什么提出涨落耗散关系，使涨落强度与温度与耗散参量之比联系起来. 然而，方程 (8.144) 有一个无对应涨落的耗散. 因为方程 (8.144) 中所有的算符是线性的，人们能基于平均速度来解读这个方程.

将方程 (8.144) 处理为具有初始值 v_0 的数学公式，时间的有关性被包含了，那么就有一个确定性的初始值问题. 函数参量被合适地标度而具有对应于分数阶导数的单位. 这个方程的解由对应的分数阶积分方程

$$v(t)-v_0=-\lambda^\alpha{}_0D_t^{-\alpha}[v(t)], \tag{8.145}$$

通过对动力学变量实施拉普拉斯变换而获得. 经过一些代数运算，有

$$\hat v(s)=\frac{v_0s^{\alpha-1}}{\lambda^\alpha+s^\alpha}. \tag{8.146}$$

方程 (8.146) 右端的逆拉普拉斯变换是

$$T_L^{-1}\left\{\frac{s^{\alpha-1}}{\lambda^\alpha+s^\alpha};t\right\}=\int_{C-\mathrm{i}\infty}^{C+\mathrm{i}\infty}\mathrm{e}^{st}\frac{s^{\alpha-1}}{\lambda^\alpha+s^\alpha}\mathrm{d}s. \tag{8.147}$$

用 Fox 函数，计算给出

$$v(t) = v_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(1+k\alpha)} (\lambda t)^{k\alpha}. \tag{8.148}$$

则均匀的分数阶微分方程的解由 Mittag-Leffler 函数给出

$$v(t) = v_0 E_\alpha[-(\lambda t)^\alpha]. \tag{8.149}$$

故该过程不像 Ornstein-Uhlenbeck 过程那样为一个指数弛豫，而是弛豫特性由 Mittag-Leffler 函数的渐进行为所确定. Mittag-Leffler 函数具有一个小参量的指数形式

$$\lim_{t\to 0} E_\alpha[-(\lambda t)^\alpha] \approx \mathrm{e}^{-(\lambda t)^\alpha}. \tag{8.150}$$

Mittag-Leffler 函数还具有一个渐进倒幂律形式

$$\lim_{t\to \infty} E_\alpha[-(\lambda t)^\alpha] \approx (\lambda t)^{-\alpha}. \tag{8.151}$$

两个弛豫区的过渡时间，扩展的指数和倒幂律均由参数 λ 确定.

3. 分数阶随机微分方程 —— 有耗散

现在寻找完全分数阶朗之万方程的解. 用等价的分数阶积分方程代替方程 (8.128)，

$$v(t) - v_0 = -\lambda^\alpha {}_0D_t^{-\alpha}[v(t)] + {}_0D_t^{-\alpha}[\xi(t)]. \tag{8.152}$$

经过一些代数运算，这个方程的拉普拉斯变换为

$$\hat{v}(s) = \frac{v_0 s^{\alpha-1}}{\lambda^\alpha + s^\alpha} + \frac{\hat{\xi}(s)}{\lambda^\alpha + s^\alpha}. \tag{8.153}$$

注意到方程 (8.153) 右边两个 s 有关的函数是不同的. 第一项的逆拉普拉斯变换是 Mittag-Leffler 函数，这已在均匀情况下被发现了；第二项的逆拉普拉斯变换为涨落和一个稳定核的卷积，这个核用 Fox 函数给出

$$T_L^{-1}\left\{\frac{1}{\lambda^\alpha + s^\alpha}; t\right\} = \frac{(\lambda t)^{\alpha-1}}{\alpha} H_{12}^{11}\left(\lambda t\Big|_{(0,1/\alpha),(1-\alpha,1)}^{(0,1/\alpha)}\right), \tag{8.154}$$

Fox 函数的级数展开为

$$\frac{1}{\alpha} H_{12}^{11}\left(\lambda t\Big|_{(0,1/\alpha),(1-\alpha,1)}^{(0,1/\alpha)}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\Gamma(\alpha+k\alpha)} (\lambda t)^{k\alpha}, \tag{8.155}$$

这里，级数是一个广义 Mittag-Leffler 函数的一种表示，并且被定义成一个一般形式：

$$E_{\alpha,\beta}(z) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k\alpha+\beta)}, \quad \alpha > 0, \quad \beta > 0. \tag{8.156}$$

当 $\beta = 1$，广义 Mittag-Leffler 函数退化为以下的形式

$$E_{\alpha,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k\alpha+1)} = E_\alpha(z). \tag{8.157}$$

故在方程 (8.152) 解中的均匀和不均匀项都能用 Mittag-Leffler 函数来表示.

现在用方程 (8.153) 的逆拉普拉斯变换，写出分数阶朗之万方程的一般解

$$v(t) = v_0 E_\alpha[-(\lambda t)^\alpha] + \int_0^t \frac{E_{\alpha,\alpha}[-\lambda^\alpha (t-t')^\alpha]}{(t-t')^{1-\alpha}} \xi(t')\mathrm{d}t'. \tag{8.158}$$

在 $\alpha = 1$ 情况下，Mittag-Leffler 函数成为一个指数，以致于分数阶朗之万方程的解等同于一个 Ornstein-Uhlenbeck 过程，

$$v(t) = v_0 \mathrm{e}^{-\lambda t} + \int_0^t \mathrm{e}^{-\lambda(t-t')} \xi(t')\mathrm{d}t'. \tag{8.159}$$

8.6.2 市场活动作为一个不规则过程

从交易时间序列的归一化计算的传统量是自相关函数和时间序列的标准偏差，后者经常被当作市场活动的参考. 我们能用分数阶朗之万方程的解 (8.158) 式计算这些量，自相关函数为

$$\begin{aligned}\langle n(t_1)n(t_2)\rangle = &\int_0^t \mathrm{d}t_1'(t_1-t_1')^{\alpha-1} \int_0^{t_2} \mathrm{d}t_2'(t_2-t_2')^{\alpha-1} \\ &\times E_{\alpha,\alpha}[-\lambda^\alpha(t_1-t_1')^\alpha] E_{\alpha,\alpha}[-\lambda^\alpha(t_2-t_2')^\alpha] \langle \xi(t_1')\xi(t_2')\rangle.\end{aligned} \tag{8.160}$$

这个方程平均是对驱动系统的无规力统计的约束，同时只要变量为金融市场变量，就可以令其初始值为零. 传统的假设是无规涨落具有高斯统计和无记忆，即它们在时间上是 δ 函数关联，见方程 (8.132). 这里，我们做后者的假设而不做前者，也就是 δ 关联涨落，但不指定统计.

1. 求积分项

现在，我们再一次看到关联积分是关于时间 t_1 和 t_2 完全对称的，因此引入大的和小的时间 $t_>$ 和 $t_<$，带进 δ 函数，则方程 (8.160) 成为

$$I = 2\int_0^{t_<} \mathrm{d}t(t_> - t)^{\alpha-1}(t_< - t)^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}[-\lambda^\alpha(t_> - t)^\alpha] E_{\alpha,\alpha}[-\lambda^\alpha(t_< - t)^\alpha]. \tag{8.161}$$

对方程 (8.161) 中的广义 Mittag-Leffler 函数进行级数展开，并且改变求和中的初始值，有

$$I=2\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha})^{k+l-2}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha)}I_{kl}, \tag{8.162}$$

其中所引入的积分为

$$I_{kl}=\int_0^{t_<}\mathrm{d}t(t_>-t)^{k\alpha-1}(t_<-t)^{l\alpha-1}. \tag{8.163}$$

将时间 $t_>$ 和 $t_<$ 从积分中分解出来，同时引入标度变量 $\zeta=t/t_<$，那么

$$I_{kl}=t_>^{k\alpha-1}t_<^{l\alpha}\int_0^1\mathrm{d}\zeta\left(1-\zeta\frac{t_<}{t_>}\right)^{k\alpha-1}(1-\zeta)^{l\alpha-1}, \tag{8.164}$$

这样一来，我们能再一次用超几何函数的积分表示 (8.135) 式去求这个积分

$$I_{kl}=t_>^{k\alpha-1}t_<^{l\alpha}\frac{\Gamma(l\alpha)}{\Gamma(l\alpha+1)}F\left(1;1-k\alpha;1+l\alpha;\frac{t_<}{t_>}\right). \tag{8.165}$$

故在交易自相关函数中的积分项为

$$I=2\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha})^{k+l-2}t_>^{k\alpha-1}t_<^{l\alpha}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha+1)}F\left(1;1-k\alpha;1+l\alpha;\frac{t_<}{t_>}\right), \tag{8.166}$$

那么完整的自相关函数是

$$\langle n(t_>)n(t_<)\rangle=4D\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha})^{k+l-2}t_>^{k\alpha-1}t_<^{l\alpha}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha+1)}F\left(1;1-k\alpha;1+l\alpha;\frac{t_<}{t_>}\right). \tag{8.167}$$

这清楚地显示其与两个时刻均有关，而不取决于其中的一个，故是一个非稳定结果. 除了方程 (8.167) 以外，人们不能获得更多的解析结果，那么这就要求对公式在某些地方做一些简化.

2. 市场行动的时间有关性

动力学变量的二次矩可在方程 (8.167) 中令 $t_>=t_<=t$ 而获得，即

$$\langle n(t)^2\rangle=4D\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha})^{k+l-2}t^{(k+l)\alpha-1}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha+1)}F\left(1;1-k\alpha;1+l\alpha;1\right), \tag{8.168}$$

其中，我们能用方程 (8.139)，即伽马函数之比去代替超几何函数. 经过合并一些项，方程 (8.168) 成为

$$\langle n(t)^2\rangle=4D\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha})^{k+l-2}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha+1)}t^{(k+l)\alpha-1}\frac{l\alpha}{l\alpha+k\alpha-1}, \tag{8.169}$$

这个方程右边项用 L 表示而写成

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t}=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha})^{k+l-2}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha)}t^{(k+l)\alpha-2},\tag{8.170}$$

积分为

$$L=\int_0^t\left[\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha}t'^{\alpha})^k}{\Gamma(k\alpha)}\right]^2\frac{\mathrm{d}t'}{t'^2}.\tag{8.171}$$

考虑 Mittag-Leffler 函数的导数，

$$\frac{\mathrm{d}E_{\alpha}[-(\lambda t)^{\alpha}]}{\mathrm{d}t}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-\lambda^{\alpha}t^{\alpha})^k}{\Gamma(k\alpha)}\frac{1}{t},\tag{8.172}$$

其中，由于伽马函数的极性，则 $k=0$ 项消失，所以速度二次矩写作

$$\langle n(t)^2\rangle=4D\int_0^t\left[\frac{\mathrm{d}E_{\alpha}[-(\lambda t')^{\alpha}]}{\mathrm{d}t}\right]^2\mathrm{d}t'.\tag{8.173}$$

我们通过保持级数展开 (8.172) 中的最低阶项，确定方程 (8.173) 的二次矩在早时间的性质. 因而，用标准偏差来测量市场活动的早期时间分析的主导项，其为

$$\lim_{t\to 0}\sqrt{\langle n(t)^2\rangle}\approx\frac{2}{\Gamma(\alpha)}\sqrt{\frac{D}{2\alpha-1}}(\lambda t)^{\alpha-1/2}.\tag{8.174}$$

这与方程 (8.138)∼(8.140) 的结果相一致.

3. 自关联函数

用方程 (8.167) 与 (8.168) 的比来确定自相关函数

$$C_{\alpha}(\tau,t)=\frac{\langle n(t)n(t-\tau)\rangle}{\langle n(t)^2\rangle},\tag{8.175}$$

这里 $t_{>}=t$，$t_{<}=t-\tau$. 引入无量纲的时间差 $\eta=\tau/t$，自相关函数作为这个量和分数阶导数指标 α 的函数为

$$C_{\alpha}(\tau,t)=\frac{\displaystyle\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k+l-2}(\lambda t)^{k\alpha+l\alpha-1}(1-\eta)^{l\alpha}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha+1)}F(1;1-k\alpha;1+l\alpha;1-\eta)}{\displaystyle\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{(-|\lambda t|^{\alpha})^{k+l-2}}{\Gamma(k\alpha)\Gamma(l\alpha+1)}F(1;1-k\alpha;1+l\alpha;1)},\tag{8.176}$$

则

$$C_{\alpha}(\tau)=\frac{A}{\eta^B}\exp|-\eta C|.\tag{8.177}$$

小结

本节建立了一个市场数据的长程记忆模型. 通过测量每单位时间的交易数目的经验研究，而识别市场活动. 其非常像一个宏观随机过程，引起长程记忆，被市场因素所仲裁，然后变换到价格涨落的某一个非线性函数，包括挥发性的测量. 这就解释了选择市场活动作为一个随机变量的合理性. 为市场活动构建了一个信息流代表的微观无规噪声驱动的宏观随机过程. 模型中没有进一步的假设，也没有假设噪声的瞬间关联的形式.

分数阶微分算符将一个短程记忆过程结合到一个长程记忆上，经验幂律的这一代表性发现能通过合适地调节分数阶导数指数而成功地再现. 不过，问题是模型的物理意义是什么？如何用经济术语来解释这些结果.

在物理系统中，幂律的出现一般对应于一个标度不变性，以致它是吸引人的. 实际上，产生物理过程的幂律行为，一个常量或接近常量的能量被储存在一个系统之中.

8.7　分数阶资产动力学

现将分形推广到金融力学，应用它去描写股票和流通市场的随机动力学. 提出一个新的分数阶动力学方法，对随机金融资产的演化进行模型化. 考虑分数阶朗之万型随机微分方程，其与标准的朗之万方程的不同在于:

(1) 对时间的一阶导数用分数 μ 阶导数代替；

(2) 高斯白噪声随机力用散粒噪声 (shot noise) 来代替，每个脉冲有一个无规振幅.

分数阶随机动力学方法能获得金融资产的分布密度函数. 下面导出一个金融市场指标的增量 Δx 作为时间延迟 Δt 函数的分布密度函数的方程，这里 $\Delta x = x(t+\Delta t) - x(t)$. 资产价格增量的统计性质在理解市场动力学和金融工程应用两个方面发挥着重要作用，例如，衍生产品的定价和风险演化. 市场指标 Δx 增量分布密度函数作为时间延迟 Δt 函数的理论估计，与著名的标准普尔 500 指数 (S&P500) 的统计依赖性进行了比较，结果显示：理论所给出的分数阶分布密度函数的中心部分和它的尾巴均与 S&P500 分布符合得很好.

8.7.1　分数阶随机动力学模型

描写金融资产的分数阶随机微分方程为

$$\frac{\mathrm{d}^{\mu} x(t)}{\mathrm{d}t^{\mu}} = \lambda x(t) + F(t), \quad 0 < \mu \leqslant 1, \tag{8.178}$$

初始条件是

$$\left.\frac{\mathrm{d}^{\mu-1}x(t)}{\mathrm{d}t^{\mu-1}}\right|_{t=0}=x_0, \tag{8.179}$$

这里 λ 是期待速率，$F(t)$ 是无规力，$\mathrm{d}^{\mu}/\mathrm{d}t^{\mu}$ 代表 μ 阶黎曼–刘维尔分数阶导数.

其解是

$$x(t;x_0,F)=t^{\mu-1}E_{\mu,\mu}(\lambda t^{\mu})x_0+\int_0^t \mathrm{d}\tau F(\tau)(t-\tau)^{\mu-1}E_{\mu,\mu}[\lambda(t-\tau)^{\mu}], \tag{8.180}$$

这里，伽马函数定义为

$$\Gamma(z)=\int_0^{\infty}\mathrm{d}t t^{z-1}\mathrm{e}^{-t},\quad \mathrm{Re}z>0. \tag{8.181}$$

随机变量 $x(t)$ 的分布密度函数 $P_{\mu}(x,t)$ 为

$$\begin{aligned}P_{\mu}(x,t)&=\langle\delta[x-x(t;x_0,F)]\rangle\\&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\exp\{\mathrm{i}\xi[x-t^{\mu-1}E_{\mu,\mu}(\lambda t^{\mu})x_0]\}\\&\quad\times\left\langle\exp\left\{-\mathrm{i}\xi\int_0^t\mathrm{d}\tau F(\tau)(t-\tau)^{\mu-1}E_{\mu,\mu}[\lambda(t-\tau)^{\mu}]\right\}\right\rangle.\end{aligned} \tag{8.182}$$

令随机力 $F(t)$ 是一个广义散粒噪声

$$F(t)=\sum_{k=1}^{n}a_k\phi(t-t_k), \tag{8.183}$$

其中，a_k 为无规振幅，ϕ 是响应 (记忆) 函数，t_k 是时间间隔 $[0,t]$ 内均匀分布时间矩，数 n 满足泊松分布.

由 (8.183) 式定义的 $F(t)$ 描写了不同的涨落因素对市场动力学的影响. 一个单散粒噪声脉冲 $a_k\phi(t-t_k)$ 描写了一部分信息的影响. 完成 (8.182) 式中的平均，有

$$P_{\mu}(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\exp\{\mathrm{i}\xi[x-t^{\mu-1}E_{\mu,\mu}(\lambda t^{\mu})x_0]\}\exp[-J_{\mu}(\xi,t)], \tag{8.184}$$

这里引入下列记法

$$J_{\mu}(\xi,t)=\mu\int_0^t\mathrm{d}t'\left(1-W\left\{\xi\int_0^t\mathrm{d}\tau\phi(\tau-t')(t-\tau)^{\mu-1}E_{\mu,\mu}[\lambda(t-\tau)^{\mu}]\right\}\right). \tag{8.185}$$

其中，$W(\zeta)$ 是概率密度分布 $P_1(a)$ 的特性函数，

$$W(\zeta)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\zeta a}P_1(a), \tag{8.186}$$

为了简单起见，$P_1(a)$ 为引入的一个单粒子分布函数，

$$P(a_1, \cdots, a_n) = \prod_{k=1}^{n} P_1(a_k). \tag{8.187}$$

换句话说，我们将概率分布 $P(a_1, \cdots, a_h)$ 按方程 (8.187) 分解成 n 个相等的单粒子分布 $P_1(a)$ 的乘积.

为了求方程 (8.184) 和 (8.185) 中的积分，限定响应函数 $\phi(t)$ 和分布密度函数 $P_1(a)$. 作为第一步，选择指数响应函数

$$\phi(t) = \exp(-t/\delta), \quad t \geqslant 0, \tag{8.188}$$

其中，δ 为特征记忆时间. 现求出方程 (8.185) 中对 $\mathrm{d}\tau$ 的积分

$$\begin{aligned}&\int_0^t \mathrm{d}\tau\phi(\tau - t')(t-\tau)^{\mu-1}E_{\mu,\mu}[\lambda(t-\tau)^{\mu}]\\&=\int_{t'}^t \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{-(\tau-t')/\delta}(t-\tau)^{\mu-1}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k(t-\tau)^{\mu k}}{\Gamma(\mu k+\mu)}.\end{aligned} \tag{8.189}$$

对 $\mathrm{e}^{-(\tau-t')/\delta}$ 进行级数展开，并利用公式

$$\int_{t'}^t \mathrm{d}\tau(t-\tau)^{a-1}(\tau-t')^{b-1} = (t-t')^{a+b-1}\frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)}, \tag{8.190}$$

给出方程 (8.189) 右端

$$\begin{aligned}&\int_{t'}^t \mathrm{d}\tau \mathrm{e}^{-(\tau-t')/\delta}(t-\tau)^{\mu-1}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\lambda^k(t-\tau)^{\mu k}}{\Gamma(\mu k+\mu)}\\&=(t-t')^{\mu}\sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{t-t'}{\delta}\right)^k E_{\mu,\mu+k+1}[\lambda(t-t')^{\mu}],\end{aligned} \tag{8.191}$$

其中，$E_{\mu,\mu+k+1}$ 是广义 Mittag-Leffler 函数. 方程 (8.185) 的函数 $J_\mu(\xi, t)$ 写作

$$J_\mu(\xi,t) = \mu\int_0^t \mathrm{d}\tau\{1 - W[\xi R_\mu(\tau;\lambda)]\} \tag{8.192}$$

和

$$R_\mu(\tau,\lambda) = \tau^{\mu}\sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{\tau}{\delta}\right)^k E_{\mu,\mu+k+1}(\lambda\tau^{\mu}). \tag{8.193}$$

第二步，选择莱维 α 稳定分布 $P_1(a)$ 作为一个单粒子分布密度函数

$$P_1(a) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\zeta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\zeta a}W(\zeta), \tag{8.194}$$

特性函数 $W(\zeta)$ 为

$$W(\zeta) = \exp(-b^{\alpha}|\zeta|^{\alpha}), \quad 0 < \alpha \leqslant 2, \tag{8.195}$$

其中，b 为莱维 α 稳定分布的尺度参数.

故按照 (8.184) 式，由方程 (8.178) 所模型的分数阶随机过程 $x(t)$ 的分布密度函数的一般解是

$$P_{\mu}(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\exp\{\mathrm{i}\xi[x-t^{\mu-1}E_{\mu,\mu}(\lambda t^{\mu})x_0]\}\times\exp\left(-\nu\int_0^t\mathrm{d}\tau\{1-\exp[-b^{\alpha}|\xi R_{\mu}(\tau;\lambda)|^{\alpha}]\}\right). \tag{8.196}$$

为了检验分数阶模型的适当性，下节将理论结果与现实金融数据相比较，即用方程 (8.196) 去研究著名的标准普尔 500 指数的统计相关性.

8.7.2　价格增量涨落分布

现在，用上节的模型去推导一个金融市场指标的增量 Δx 的分布密度函数作为时间延迟 Δt 的函数的解析公式，其中，市场指标的值用 $x(t)$ 代表. 价格增量涨落的分布密度函数在理解市场动力学和金融工程应用中发挥重要作用.

通常，我们定义一个金融市场指标 $x(t)$(例如，流通速率) 的增量 $\Delta x(t)=x(t+\Delta t)-x(t)$ 的分布密度函数 $P_{\alpha,\mu}(\Delta x,t,\Delta t)$ 为下列等式:

$$P_{\alpha,\mu}(\Delta x,t,\Delta t)=\langle\delta\{\Delta x-[x(t+\Delta t;x_0,F)-x(t;x_0,F)]\}\rangle, \tag{8.197}$$

其中，$\langle\cdots\rangle$ 代表对无规力 $F(t)$ 的所有可能实现的平均，重复与推导方程 (8.196) 相同的步骤，发现 $P_{\alpha,\mu}(\Delta x,t,\Delta t)$：

$$P_{\alpha,\mu}(\Delta x,t,\Delta t)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\xi\cos\xi(\Delta x-\{(t+\Delta t)^{\mu-1}E_{\mu,\mu}[\lambda(t+\Delta t)^{\mu}]-t^{\mu-1}E_{\mu,\mu}(\lambda t^{\mu})\}x_0)\times\exp[-L_{\alpha,\mu}(\xi,t,\Delta t;\lambda)], \tag{8.198}$$

其中，

$$L_{\alpha,\mu}=\mu\int_0^t\mathrm{d}\tau\{1-\exp[-b^{\alpha}\xi^{\alpha}|R_{\mu}(\tau+\Delta t;\lambda)-R_{\mu}(\tau;\lambda)|^{\alpha}]\}, \tag{8.199}$$

这里 $R_{\mu}(\tau;\lambda)$ 已由方程 (8.193) 定义.

至此，(8.198) 式就是价格增量涨落 $\Delta x=x(t+\Delta t)-x(t)$ 的分布密度函数的一般公式，而价格变量 $x(t)$ 的动力学由分数阶随机微分方程 (8.178) 所描写.

为了避开繁琐的公式，我们的目标仅是去发展金融的一般方法，我们局限于 $\lambda=0$ 的情形. 那么方程 (8.198) 重写为

$$P_{\alpha,\mu}(\Delta x,t,\Delta t)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\xi\cos(\xi)\left\{\Delta x-\frac{1}{\Gamma(\mu)}[(t+\Delta t)^{\mu-1}-t^{\mu-1}]x_0\right\}\times\exp[-L_{\alpha,\mu}(\xi,t,\Delta t)], \tag{8.200}$$

其中，$L_{\alpha,\mu}(\xi,t,\Delta t)$ 具有如下的形式

$$L_{\alpha,\mu}=\mu\int_0^t \mathrm{d}\tau\{1-\exp[-b^\alpha\xi^\alpha|r_\mu(\tau+\Delta t)-r_\mu(\tau)|^\alpha]\}, \tag{8.201}$$

而 $r_\mu(\tau)$ 是由 $R_\mu(\tau;\lambda)$(方程 (8.193)) 令 $\lambda=0$ 获得，

$$r_\mu(\tau)\equiv R_\mu(\tau;\lambda=0)=\tau^\mu E_{1,1+\mu}(-\tau/\delta). \tag{8.202}$$

进一步，我们感兴趣极限情况 $t\to\infty$，有

$$P_{\alpha,\mu}(\Delta x,\Delta t)=\lim_{t\to\infty}P_{\alpha,\mu}(\Delta x,t,\Delta t)=\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\cos(\xi\Delta x)\exp[-L_{\alpha,\mu}(\xi,\Delta t)], \tag{8.203}$$

其中，$L_{\alpha,\mu}(\xi,\Delta t)$ 定义为

$$\begin{aligned}L_{\alpha,\mu}(\xi,\Delta t)&=\lim_{t\to\infty}L_{\alpha,\mu}(\xi,t,\Delta t)\\&=\nu\int_0^t \mathrm{d}\tau\{1-\exp[-b^\alpha\xi^\alpha|r_\mu(\tau+\Delta t)-r_\mu(\tau)|^\alpha]\},\\&\quad 0<\mu\leqslant 1,\quad 1<\alpha\leqslant 2.\end{aligned} \tag{8.204}$$

分布密度函数的极限 $P_{\alpha,\mu}(\Delta x,\Delta t)$ 由分数阶指数 μ 和莱维指数 α 所特征，上节发展的一般分数阶动力学方法可以用来推导利润的分布密度函数 $P_{\alpha,\mu}(\Delta x,\Delta t)$. 新的分布密度函数 $P_{\alpha,\mu}(\Delta x,\Delta t)$ 允许人们研究利润涨落动力学的任何统计和标度有关性，不过，发展新的一般分数阶方法要冒分数阶导数演化和复杂代价的风险.

在非分数阶的特殊情况下 $(\mu=1)$，方程 (8.204) 能表示成

$$L_{\alpha,1}(\xi,\Delta t)=\nu\int_0^\infty \mathrm{d}\tau\{1-\exp[-(b|\xi|\delta)^\alpha|\mathrm{e}^{-\tau/\delta}(1-\mathrm{e}^{-\Delta t/\delta})|^\alpha]\}, \tag{8.205}$$

我们知道 $\Gamma(1)=1$ 且

$$E_{1,2}(z)=\frac{\mathrm{e}^z-1}{z}. \tag{8.206}$$

方程 (8.203) 导致

$$\begin{aligned}P_{\alpha,1}(\Delta x,\Delta t)=&\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\cos(\xi\Delta x)\\&\times\exp\left[-\nu\int_0^\infty(1-\exp\{-(b\xi\delta)^\alpha[\mathrm{e}^{-\tau/\delta}(1-\mathrm{e}^{-\Delta t/\delta})]^\alpha\})\right].\end{aligned} \tag{8.207}$$

引入新的变量 u 代替 τ，

$$u=b\xi\delta\mathrm{e}^{-\tau/\delta}(1-\mathrm{e}^{-\Delta t/\delta}),\quad \mathrm{d}u=-\frac{u}{\delta}\mathrm{d}\tau, \tag{8.208}$$

得到 $P_{\alpha,1}(\Delta x,\Delta t)$ 的公式

$$P_{\alpha,1}(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\xi \cos(\xi\Delta x) \exp\left\{-\nu\delta \int_0^{b\delta(1-\mathrm{e}^{-\Delta t/\delta})\xi} \frac{\mathrm{d}u}{u}(1-\mathrm{e}^{-u^{\alpha}})\right\}. \tag{8.209}$$

在高斯情况 ($\alpha = 2$)，分布密度函数 $P_{2,1}(\Delta x, \Delta t)$ 已在文献 (Nikolai, 1999) 中给出.

8.7.3 与现实数据的比较

现在，将理论上的分布密度函数与著名的 S&P500 利润的现实分布密度函数进行比较，见图 8.7. 图中圆圈代表芝加哥商业交易所从 1984 年至 1989 年期间的数据. S&P500 指数的方差被归一化到 $\sigma = 0.0508$ 值. 实线代表用平常的对称莱维 α 稳定分布：

$$P_{\text{Levy}}(\Delta x/\sigma) = \frac{1}{\pi\sigma}\int_0^{\infty} \mathrm{d}y \cos(y\Delta x/\sigma)\mathrm{e}^{-\gamma y^{\alpha'}}, \tag{8.210}$$

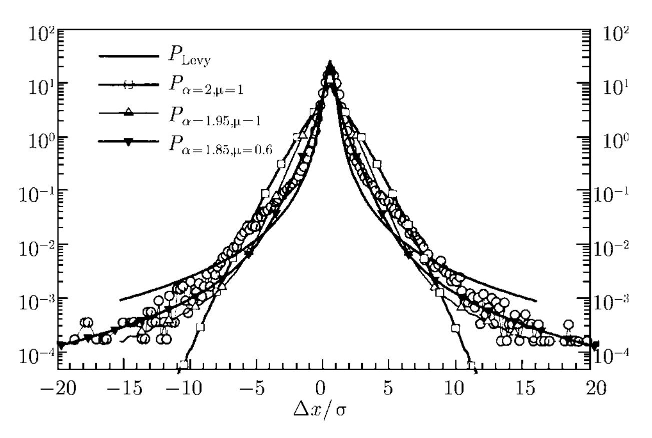


图 8.7 理论分布密度函数与 S&P500 数据的比较

去简单拟合现实数据的结果，这里 $\alpha' = 1.40$，标度因子 $\gamma = 0.00375$. 近似地，对称 α 稳定 ($\alpha \equiv \alpha' = 1.40$) 莱维分布偏离指数分布发生在 $|\Delta x|\sigma \geqslant 6$.

$$L_{\alpha,\mu}(\eta, \Delta\tau) = D\int_0^{\infty} \mathrm{d}z\{1 - \exp[-S_{\mu}^{\alpha}\eta^{\alpha}|s_{\mu}(z+\Delta\tau) - s_{\mu}(z)|^{\alpha}]\}, \tag{8.211}$$

式中，$\Delta\tau = \Delta t/\delta$ 为无量纲的时间延迟，无量纲参数 D 和 S_{μ} 分别定义为 $D = \nu\delta$，$S_{\mu} = b\delta^{\mu}/\sigma$，函数 $s_{\mu}(z)$ 为

$$s_{\mu}(z) = z^{\mu}E_{1,1+\mu}(-z). \tag{8.212}$$

图 8.7 画出了由下列方程给出的 $P_{\alpha,\mu}(\Delta x/\sigma, \Delta\tau)$，

$$P_{\alpha,\mu}(\Delta x/\sigma, \Delta\tau) = \frac{1}{\pi\sigma}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\eta \cos(\eta\Delta x/\sigma) \exp[-L_{\alpha,\mu}(\eta, \Delta\tau)], \tag{8.213}$$

其中，$L_{\alpha,\mu}(\eta,\Delta\tau)$ 由方程 (8.211) 给出，$D = 1.4$，$S_\mu = 0.12$, $\Delta\tau = 0.5$. 降低 α ($\alpha < 2$) 和 μ ($\mu < 1$)，结果使得分布密度函数的中心变窄，尾巴变得明显. 通过改变分数阶参数 α 和 μ，就有可能拟合现实观测的分布密度函数.

容易看到，当 $\alpha = 1.85$ 和 $\mu = 0.6$，分数阶分布密度函数 $P_{1.85,0.6}(\Delta x/\sigma, \Delta\tau = 0.5)$ 很好地与现实数据的分布密度函数的中心部分相符，也与 S&P500 指数利润的实时间延迟 1 分钟现实观测分布的尾巴符合.

小结

金融市场高频率的数据，使在对短于 1 分钟时间尺度的市场动力学的研究成为可能. 现实的数据显现非高斯和非莱维长尾分布，那么就不能用传统的高斯和莱维方法来解释.

本节在金融力学和工程中建立了分数阶概念，主要假设是涨落市场现象能被充分地用分数阶、非高斯、长程相关的随机过程来描述. 为了描写价格动力学，引入了新的分数阶随机微分方程，随机力是广义散粒噪声，每个脉冲有一个随机振幅，其分布为 α 稳定莱维分布. 作为结果，给出了利润的分数阶分布密度函数的一个公式 [方程 (8.198)]. 理论估计与 S&P500 指数从 1984 年 1 月至 1989 年 12 月的现实数据进行了比较. 分析证实 S&P500 指数分布的中心部分和渐进尾巴的行为与理论上的分数阶分布密度函数很好地相符.

这种新的分数阶分布密度函数有两个 (分形) 参数 μ 和 α，其中参数 μ 描写了在市场随机演化中的动力学记忆效应；而莱维指数 α 描写了外部因素对市场动力学的长程有关性. 通过比较现实和理论分布，得出涨落市场现象具有分形行为.

习　　题

8-1　试分析受迫分数阶谐振子的动力学共振.

8-2　试分析分数阶加速度的意义?

第 9 章　分数阶福克尔–普朗克方程

本章导读：为了描写欠扩散系统在外势中的分布密度函数随时的演化，引入分数阶福克尔–普朗克方程，其中分数阶导数的存在是与连续时间无规行走模型中的长尾等待时间直接有关的. 这类方程必须满足: ① 在缺少外力场情况下，给出方均位移随时间低于线性增长；② 当存在一个非线性和时间无关场时，稳定态解为玻耳兹曼分布；③ 广义爱因斯坦关系被满足；④ 当扩散指数为 1 时，该方程应该退回到通常的福克尔–普朗克方程. 最后用积分变换方法得到几种方程的解.

9.1　接近热平衡的反常扩散和弛豫

如何实现形如以下的一维粒子随机运动出现反常扩散呢？

$$\langle[\Delta x(t)]^2\rangle = \frac{2K_\gamma}{\Gamma(1+\gamma)}t^\gamma, \tag{9.1}$$

它偏离了布朗运动的线性时间依赖性. 在 (9.1) 式中，出现了一个广义扩散系数 K_γ，量纲为 $[K_\gamma] = \mathrm{cm}^2 \cdot \mathrm{s}^{-\gamma}$. 本节处理欠扩散区域 $0 < \gamma < 1$. 欠扩散输运的例子是各色各样的，包括非晶形半导体中的电荷输运.

如所周知，包括外场的正常扩散问题经常用福克尔–普朗克方程 (FPE) 来模型化:

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t) = L_{\mathrm{FP}}W, \tag{9.2}$$

其中，线性 FP 算符定义为

$$L_{\mathrm{FP}} = \partial/\partial x V'(x)/(m\eta_1) + K_1\partial^2/\partial x^2.$$

FPE 的基本性质是模的指数衰减性和爱因斯坦关系，这些与涨落耗散定理、线性响应理论以及力自由情况的高斯演化密切相关. 对于一个 FPE 所描述的接近热平衡系统，其稳定解必须是玻尔兹曼分布.

分数阶福克尔–普朗克方程需要满足的性质:

(1) 当存在一个与时间无关的约束势，则稳定解是玻尔兹曼分布；

(2) 与线性响应理论相一致，广义爱因斯坦关系必须被满足；

(3) 单模弛豫按照 Mittag-Leffler 函数进行；

(4) 在 $\alpha \to 1$ 极限下，标准的斯莫卢霍夫斯基–福克尔–普朗克 (Smolochowski Fokker-Planck) 方程被恢复. 这里的方法是基于作用于时间的分数阶导数，而其他方法不能全部满足这些要求.

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t) = {}_0D_t^{1-\gamma}L_{\mathrm{FP}}W, \tag{9.3}$$

其中，

$$ {}_0D_t^{1-\gamma}W = \frac{1}{\Gamma(\gamma)}\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \mathrm{d}t'\frac{W(x,t')}{(t-t')^{1-\gamma}}, \quad 0<\gamma<1. \tag{9.4}$$

故方程 (9.3) 为一个积分–微分方程. 黎曼–刘维尔算符 (9.4) 式引入了一个慢衰减的幂律核的卷积积分，这其实象征着复杂系统的记忆效应. 因为 ${}_0D_t^0W = W(x,t)$，所以当 $\gamma \to 1$, 分数阶福克尔–普朗克方程 (FFPE)(9.3) 退化到标准的 FPE(9.2) 式. 假设自然边界条件：$\lim\limits_{t\to\pm\infty} W(x,t) = 0$；方程 (9.3) 的初始条件为 $t = 0$，系统是在态 $W(x,0)$ 上的分布.

我们将证明广义 FPE(9.3) 满足 (1)∼ (4) 的所有要求. 模的指数衰减被长尾记忆效应所修正，以致产生一个慢幂律模衰减，即 Mittag-Leffler 函数.

分数阶导数的存在是与连续时间无规行走理论中的长尾等待时间直接有关的. 将这个无规行走概念推广到一个外力场中，FFPE(9.3) 和 FP 算符 (9.4) 式能从广义主方程唯一地推导出.

FFPE(9.3) 式右边等价于分数阶导数：$-{}_0D_t^{1-\gamma}\partial S(x,t)/\partial x$，这里，$S=[-V'(x)/(m\eta_\gamma)-K_\gamma\partial/\partial x]W(x,t)$ 是概率流. 若对于任何 x，$S=0$，则给出稳定解：$V'(x)W_{\mathrm{st}}/(m\eta_\gamma)+K_\gamma W'_{\mathrm{st}}=0$. 将这个方程与所要求的玻尔兹曼分布比较，可以发现对于广义扩散系数 K_γ 和广义摩擦系数 η_γ，存在广义爱因斯坦关系，也称为 Stokes-Einstein-Smoluchowski 关系：

$$K_\gamma = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m\eta_\gamma}. \tag{9.5}$$

故由方程 (9.3) 描写的过程，这两个系数满足线性关系[①]，此即为涨落耗散定理.

当存在一个均匀力场，即势为 $V(x) = -Fx$ 的情况下，系统产生一个净漂移. 通过 FFPE(9.3) 计算 $\langle x(t)\rangle_F = \int \mathrm{d}xxW$，获得

$$\langle x(t)\rangle_F = \frac{F}{m\eta_\gamma}\frac{t^\gamma}{\Gamma(1+\gamma)}. \tag{9.6}$$

在缺少力场情况下，方程 (9.3) 给定的位移平方平均的结果为

① 在 Smoluchowski-Fokker-Planck 方程 $D_x = k_{\mathrm{B}}T/(\eta m)$；而在 Kramers-Fokker-Planck 方程 $D_v = \eta k_{\mathrm{B}}T/m$，从物理直觉上来讲，扩散系数应该是粒子分布密度函数的宽度随时间增长的速率，粒子在速度空间是弛豫而不扩散的，因为即使无势场，就好像把一滴墨汁放入纯净的水中，从而流体力学摩擦系数正比于液体的浓度.

$$\langle x^2(t)\rangle_0 = \frac{2K_\gamma t^\gamma}{\Gamma(1+\gamma)}, \tag{9.7}$$

注意脚标 F 和 0 分别表示存在和缺少力场. 利用方程 (9.5)，我们重新获得关系:

$$\langle x(t)\rangle_F = \frac{F}{2k_{\mathrm{B}}T}\langle x^2(t)\rangle_0. \tag{9.8}$$

这个公式将均匀力场中粒子的平均位移与无外场时粒子的方均位移联系起来，被称为广义爱因斯坦关系①. 这个关系也能在线性响应区域，用系统的哈密顿描写，从第一性原理出发得到证明；它还被聚合物系统在欠扩散区的实验所证实.

现在考虑方程 (9.3) 存在一个任意外力场 $F(x)$，$W(x,t)$ 的瞬间演化. 对 FPE (9.2) 而言，用算符公式表达的一个形式解为：$W(x,t) = \exp(L_{\mathrm{FP}}t)W(x,0)$. 在 FFPE(9.3)，我们发现

$$W(x,t) = E_\gamma(L_{\mathrm{FP}}t^\gamma)W(x,0), \tag{9.9}$$

为其对应的形式解. 其中，E_γ 代表 Mittag-Leffler 函数，为指数函数的自然扩展，它用级数来表示

$$E_\gamma(z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\Gamma(1+\gamma n)}, \tag{9.10}$$

当 $\gamma=1$，Mittag-Leffler 函数退化为高斯函数.

为了给出方程 (9.3) 的解，引入分离变量

$$W_n(x,t) = \phi_n(x)T_n(t), \tag{9.11}$$

其中，脚标 n 代表 L_{FP} 的一个本征值. 将分解式 (9.11) 代入式 (9.3)，得

$$\dot{T}_n\phi_n = \left[{}_0D_t^{1-\gamma}T_n\right]L_{\mathrm{FP}}\phi_n \tag{9.12}$$

所以，通过导数 $({}_0D_t^{1-\gamma}T_n)\phi_n$ 去分离方程 (9.12) 之后，得到关于 $\lambda_{n,\gamma}$ 的两个本征方程

$$\begin{aligned}\dot{T}_n &= -\lambda_{n,\gamma}\ {}_0D_t^{1-\gamma}T_n,\\ L_{\mathrm{FP}}\phi_n &= -\lambda_{n,\gamma}\phi_n.\end{aligned} \tag{9.13}$$

无量纲因子 $\lambda_{n,\gamma}$ 与标准的本征值 $\lambda_{n,1}$ $(\lambda=1)$ 存在一个比例关系：$\lambda_{n,\lambda} = (\eta_1/\eta_\gamma)\lambda_{n,1}$. 方程 (9.13) 的解为单调下降的 Mittag-Leffler 函数，

$$T_n(t) = E_\gamma(-\lambda_{n,\gamma}t^\gamma), \tag{9.14}$$

其总是正的. 方程 (9.3) 的完全解为对所有本征值求和

① 如果将布朗运动情形下的一些定理和关系称为正常或狭义的，那么人们就习惯将非马尔可夫、反常扩散意义的对应理论和关系称作广义或者推广的.

$$W(x,t|x',0)=\mathrm{e}^{\varPhi(x')/2-\varPhi(x)/2}\sum_n \psi_n(x)\psi_n(x')E_\gamma(-\lambda_{n,\gamma}t^\gamma), \tag{9.15}$$

初始分布集中在 x'. 这里，$\psi_n(x)=\mathrm{e}^{\varPhi(x)/2}\phi_n(x)$ 为 FP 算符 L_{FP} 的本征函数，其中 $\varPhi(x)=V(x)/(k_{\mathrm{B}}T)$ 为标度势. $\psi_n(x)$ 是 Hermitian 算符 $L=\mathrm{e}^{-\varPhi}L_{\mathrm{FP}}\mathrm{e}^{\varPhi}$ 的本征函数，L 和 L_{FP} 有相同的本征值. 将本征值安排成增加的次序，即 $0\leqslant\lambda_{0,\gamma}<\lambda_{1,\gamma}<\lambda_{2,\gamma}<\cdots$，如果存在一个稳态解，则第一个本征值为零. 这个稳态解为

$$W_{\mathrm{st}}=\lim_{t\to\infty}W(x,t)=\mathrm{e}^{\varPhi(x')/2-\varPhi(x)/2}\psi_0(x)\psi_0(x'), \tag{9.16}$$

其完全与标准情况 $\gamma=1$ 相一致，即玻尔兹曼分布. 但是一个单模 n 的弛豫并不是指数的，而是像 $E_\gamma(-\lambda_{n,\gamma}t^\gamma)\sim 1/(\lambda_{n,\gamma}t^\gamma)$ $(\lambda_{n,\gamma}t^\gamma\gg1)$ 一样慢地衰减.

用一个简单例子来考虑非稳定行为，即简谐势 $V(x)=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ 的 Ornstein-Uhlenbeck 过程的弛豫过程，解为

$$W(x,t|x',0)=\sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^n n!}E_\gamma(-n\tilde{t}^\gamma)H_n\left(\frac{\tilde{x}'}{\sqrt{2}}\right)H_n\left(\frac{\tilde{x}}{\sqrt{2}}\right)\mathrm{e}^{-\tilde{x}^2/2}, \tag{9.17}$$

其中，无量纲时间和坐标为 $\tilde{t}=t/\tau$ 和 $\tilde{x}=x\sqrt{m\omega^2/(k_{\mathrm{B}}T)}$，以及 $\tau^{-\gamma}=\omega^2/\eta_\gamma$. H_n 代表 Hermite 多项式，本征值为 $\lambda_{n,\gamma}=n\omega^2/\eta_\gamma$. 从方程 (9.17) 看到 $n=0$ 项的行为是常数，与 γ 无关，剩余项衰减. 故对于所有 γ，稳定解是相同的，即玻尔兹曼分布.

该过程的前两次矩可从方程 (9.3) 计算，

$$\begin{aligned}\langle x(t)\rangle&=\langle x(0)\rangle E_\gamma[-(t/\tau)^\gamma],\\ \langle x^2(t)\rangle&=\langle x^2\rangle_{\mathrm{th}}+[\langle x^2(0)\rangle-\langle x^2\rangle_{\mathrm{th}}]E_\gamma[-2(t/\tau)^\gamma]\end{aligned} \tag{9.18}$$

当 $\gamma=1$，退化为通常的指数弛豫行为. 在长时间极限下，有热平衡值 $\langle x^2\rangle_{\mathrm{th}}=k_{\mathrm{B}}T/(m\omega^2)$. Mittag-Leffler 函数 $E_\gamma[-2(t/\tau)^\gamma]$ 短时间的行为是 $1-2(t/\tau)^\gamma/\Gamma(1+\gamma)$；长时间后，其近似为 $(t/\tau)^{-\gamma}/[2\Gamma(1-\gamma)]-(t/\tau)^{-2\gamma}/[4\Gamma(1-2\gamma)]$. 所以，(9.18) 式的短时间行为与 ω 无关；而长时间后，系统以幂律形式慢趋于热平衡值 $\langle x^2\rangle_{\mathrm{th}}$，这与标准情况的快平衡是相反的.

对于 FFPE(9.3)，我们在拉普拉斯空间发现标度关系：

$$W_\gamma(x,u)=(\eta_\gamma/\eta_1)u^{\gamma-1}W_1[x,(\eta_\gamma/\eta_1)u^\gamma] \tag{9.19}$$

相同的初始条件 $W(x,0)=\delta(x-x')$，下脚标涉及分数阶情况 $\gamma\in(0,1)$，标准情况 $\gamma=1$. 这意味着在拉普拉斯空间[①]，对于标度拉普拉斯变量 $(\eta_\gamma/\eta_1)u^\gamma$ 而

① 为了变为代数方程，单边和双边变换，由于时间是非负的，所以对时间的导数积分运算实施拉普拉斯变换；而坐标空间在原点两侧进行傅里叶变换.

言，$W_\gamma(x,u)$ 与 $W_1[x,(\eta_\gamma/\eta_1)u^\gamma]$ 有着相同的 x 分布，仅需用因子 $(\eta_\gamma/\eta_1)u^{\gamma-1}$ 来重新标度.

与标准的 FPE 一样，FFPE(9.3) 在力自由情况下能进行一个标度变量的处理. 用标度观点能显示 $W_{F=0}(x,t)=(K_\gamma t^\gamma)^{-1/2}f(z)$，这里无量纲变量 $z=x/(K_\gamma t^\gamma)^{1/2}$. $W_{F=0}$ 的渐进态为一个伸长的高斯函数，而对任意外势 $V(x)$，则没有如此简单的标度行为.

若试探用时间上的分数阶导数代替一阶导数，即 $\dot{W}\to {}_0D_t^\gamma W$ 去推广 FPE，则一种 FFPE 的形式为：${}_0D_t^\gamma W=L_{\rm FP}W$. 然而，这种方案并不是合适的，这能从对这一方程两边对 x 积分看出. 由于自然边界条件，右边消失，但对于左边，结果却是 ${}_0D_1^\gamma 1=t^{-\gamma}/\Gamma(1-\gamma)$. 不过，这种缺点在方程 (9.3) 中并不存在.

9.2 分数阶福克尔–普朗克方程、解及其应用

分数阶扩散方程描写了一个欠扩散过程，粒子方均位移写作：$\langle r^2(t)\rangle\sim t^\alpha$ $(0<\alpha<1)$. 这一方程也描写了连续时间无规行走的渐进行为. 描写如此欠扩散系统在一个外场 $F(x)$ 中的输运行为，则要用到分数阶福克尔–普朗克方程，如果外势为一个有界势，则过程通过时间有关的弛豫而趋于热平衡. 在文献 (Barkai et al.，2000) 和 (Metzler，2000) 中，FFPE 是由广义连续时间无规行走导出的，其中包括了空间有关的跳跃概率.

9.2.1 分数阶福克尔–普朗克方程的引入

本节的目的是提供一个解 FFPE 的简单方法，解是基于从高斯型扩散映射到分数阶扩散的积分变换. 已知正常福克尔–普朗克方程的解为 $P_1(x,t)$，则分数阶福克尔–普朗克方程的解 $P_\alpha(x,t)$ 表示为

$$P_\alpha(x,t)=\int_0^\infty n(s,t)P_1(x,s)\mathrm{d}s, \tag{9.20}$$

其中，$0<\alpha<1$，

$$n(s,t)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left[1-L_\alpha\left(\frac{t}{s^{1/\alpha}}\right)\right], \tag{9.21}$$

代表逆单边莱维稳定密度，即 $L_\alpha(x)$ 是单边 $(x\geqslant 0)$ 莱维稳定分布. 在方程 (9.20) 中，分布密度函数 $P_\alpha(x,t)$ 与对应的 $P_1(x,t)$ 有相同的边界条件. 我们称方程 (9.20) 为逆莱维变换. 例如，考虑具有自由边界条件和初始条件在坐标原点的力自由情况. FFPE 的解 $P_\alpha(x,t)$ 由 FPE 的解 $P_1(x,t)$ 变换而来.

令 $P(x,t)\geqslant 0$ 为一个归一化的分布密度函数，有

$$\int_{-\infty}^\infty P(x,t)\mathrm{d}x=1. \tag{9.22}$$

一个高斯马尔可夫类型的扩散在外场 $F(x)$ 中，并且是接近热平衡的，可以被基于线性斯莫卢霍夫斯基–福克尔–普朗克方程来模型，即

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = K_1 L_{\mathrm{FP}} P(x,t), \tag{9.23}$$

其中算符

$$L_{\mathrm{FP}} = -\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{T} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \tag{9.24}$$

这里，K_1 和 T 分别是扩散系数和温度. 我们基于分数阶黎曼–刘维尔积分，考虑方程 (9.23) 的一种推广，重新将方程 (9.23) 写成积分的形式

$$P(x,t) - \delta(x-x_0) = K_1\ {}_0D_t^{-1} L_{\mathrm{FP}} P_1(x,t), \tag{9.25}$$

这里 $\delta(x-x_0)$ 是初始条件，并且假设自由边界条件. 将方程 (9.25) 中的整数阶积分算符 ${}_0D_t^{-1}$ 用一个分数阶黎曼–刘维尔积分算符替代，

$${}_0D_t^{-\alpha} Z(t) \equiv \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_0^t \frac{Z(t')}{(t-t')^{1-\alpha}}\mathrm{d}t', \tag{9.26}$$

则有

$$P_\alpha(x,t) - \delta(x-x_0) = K_\alpha\ {}_0D_t^{-\alpha} L_{\mathrm{FP}} P_\alpha(x,t), \tag{9.27}$$

其中, K_α 是一个广义扩散系数. 对方程 (9.27) 进行一次通常的微分，得到分数阶福克尔–普朗克方程：

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = K_\alpha\ {}_0D_t^{1-\alpha} L_{\mathrm{FP}} P(x,t). \tag{9.28}$$

容易证明方程 (9.28) 中的 $P(x,t)$ 是归一化的、非负的. 分数阶福克尔–普朗克方程 (9.28) 也可以从连续时间无规行走模型推导出.

现对方程 (9.28) 或 (9.27) 实施拉普拉斯变换，

$$u\hat{P}(x,u) - \delta(x-x_0) = K_\alpha u^{1-\alpha} L_{\mathrm{FP}} \hat{P}(x,u), \tag{9.29}$$

这里拉普拉斯变换定义为

$$\hat{P}(x,u) = \int_0^\infty P(x,t)\mathrm{e}^{-ut}\mathrm{d}t. \tag{9.30}$$

让我们总结分数阶福克尔–普朗克方程的特性：① 当存在一个外部时间无关的有界势时，稳定解是玻尔兹曼分布；② 由于线性响应理论，广义爱因斯坦关系成立；③ 单模弛豫遵守 Mittag-Leffler 型; ④ 在极限 $\alpha\to 1$ 下，标准的斯莫卢霍夫斯基–福克尔–普朗克方程被恢复.

基于分数阶时间导数，一个另外形式的分数阶福克尔–普朗克方程能被写出，

即在通常福克尔–普朗克方程的左端，用一个分数阶时间导数来代替 ∂_t，

$$ {}_0D_t^{\alpha}Z(t) \equiv \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)}\frac{\partial}{\partial t}\int_0^t \frac{Z(t')}{(t-t')^{\alpha}}\mathrm{d}t', \tag{9.31} $$

则方程 (9.23) 成为

$$ {}_0D_t^{\alpha}P(x,t) = K_{\alpha}L_{\mathrm{FP}}P(x,t), \tag{9.32} $$

这里 $0<\alpha<1$. 不过，注意到如此的分数阶福克尔–普朗克方程并不是适宜的，因为分布密度函数 $P(x,t)$ 不是一个可归一化的非负函数.

值得注意的是还有一些工作给出了其他类型的分数阶福克尔–普朗克方程，例如，用到了空间分数阶导数. 空间分数阶导数是被用来描写莱维飞行的，这是一种超扩散，与之相反，这里用到的时间分数阶导数是来研究欠扩散.

9.2.2　积分变换法

为了给出方程 (9.28) 的解，引入

$$ P(x,t) = \int_0^{\infty} n(s,t)P_1(x,s)\mathrm{d}s, \tag{9.33} $$

其中，

$$ \frac{\partial P_1(x,s)}{\partial s} = L_{\mathrm{FP}}P_1(x,s). \tag{9.34} $$

以上方程中的 $P_1(x,s)$ 为正常福克尔–普朗克方程在初始条件 $P_1(x,s=0)=\delta(x-x_0)$ 和自由边界下的归一化解. 如果方程 (9.20) 是适宜的，那么

$$ n(s,t) = \frac{1}{\alpha}\frac{t}{s^{1+1/\alpha}}l_{\alpha}\left(\frac{t}{s^{1/\alpha}}\right), \tag{9.35} $$

其中，l_{α} 是单边莱维稳定概率密度，$z\to u$ 的拉普拉斯变换为

$$ \hat{l}_{\alpha}(u) = \exp(-u^{\alpha}). \tag{9.36} $$

在方程 (9.33) 和 (9.35)，$K_{\alpha}=1$，以后将恢复物理单位.

现对方程 (9.33) 进行拉普拉斯变换，并利用 $P(x,t)$ 的归一化条件，有

$$ \int_0^{\infty}\hat{n}(s,u)\mathrm{d}s = 1/u. \tag{9.37} $$

从方程 (9.37)，我们看到 $n(s,t)$ 是归一化的，$\int_0^{\infty}n(s,t)\mathrm{d}s=1$. 将方程 (9.33) 代入方程 (9.29)，有

$$ \begin{aligned} &u\int_0^{\infty}\hat{n}(s,u)P_1(x,s)\mathrm{d}s - \delta(x-x_0) \\ =&u^{1-\alpha}\int_0^{\infty}\hat{n}(s,u)L_{\mathrm{FP}}P_1(x,s)\mathrm{d}s, \end{aligned} \tag{9.38} $$

用方程 (9.34)，对以上方程右端进行分部积分，得到

$$\begin{aligned}&u\int_0^{\infty}\hat{n}(s,u)P_1(x,s)\mathrm{d}s-\delta(x-x_0)\\=&u^{1-\alpha}[\hat{n}(\infty,u)P_1(x,s=\infty)-\hat{n}(0,u)P_1(x,s=0)]\\&-u^{1-\alpha}\int_0^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial s}\hat{n}(s,u)\right]P_1(x,s)\mathrm{d}s.\end{aligned}\tag{9.39}$$

从方程 (9.37)，$\hat{n}(\infty,u)=0$，在方程 (9.39) 中的 $P_1(x,s=\infty)$ 为正常福克尔–普朗克方程的稳态解. 若势为有界的，$P_1(x,s=\infty)$ 就是玻尔兹曼分布；又因为 $P_1(x,s=0)=\delta(x-x_0)$，我们重写方程 (9.39)：

$$\begin{aligned}&\int_0^{\infty}\left\{u\hat{n}(s,u)+u^{1-\alpha}\frac{\partial}{\partial s}\hat{n}(s,u)\right\}P_1(x,s)\mathrm{d}s\\=&[1-u^{1-\alpha}\hat{n}(0,u)]\delta(x-x_0).\end{aligned}\tag{9.40}$$

一旦方程 (9.40) 的两边均等于零，则这个方程是可解的，那么两个条件必须被满足:

$$\hat{n}(0,u)=u^{\alpha-1}\tag{9.41}$$

和

$$\frac{\partial}{\partial s}\hat{n}(s,u)=-u^{\alpha}\hat{n}(s,u).\tag{9.42}$$

用初始条件 (9.41)，方程 (9.42) 的解为

$$\hat{n}(s,u)=u^{\alpha-1}\exp(-u^{\alpha}s).\tag{9.43}$$

那么，$\hat{n}(s,u)$ 的逆拉普拉斯变换就是 $n(s,t)$，即方程 (9.35).

现在显示解 (9.33) 式与文献 (Metzler et al.，1999) 的解是一致的. 用著名的本征函数公式重写 $P_1(x,s)$

$$P_1(x,s)=\mathrm{e}^{\Phi(x)/2-\Phi(x_0)/2}\sum_n\psi_n(x)\psi_n(x_0)\mathrm{e}^{-\lambda_n s},\tag{9.44}$$

这里，$\psi_n(x)=\exp[\Phi(x)/2]\phi_n(x)$，$\phi_n(x)$ 为福克尔–普朗克算符 L_{FP} 通过标度势 $\Phi(x)=V(x)/(k_{\mathrm{B}}T)$ 的本征函数，而 λ_n 是对应的本征值. 现将方程 (9.44) 代入方程 (9.33) 的拉普拉斯变换，并利用方程 (9.43) 有

$$\hat{P}(x,u)=\int_0^{\infty}u^{\alpha-1}\exp(-su^{\alpha})\exp[\Phi(x)/2-\Phi(x_0)/2]\sum_n\psi_n(x)\psi_n(x_0)\exp(-\lambda_n s)\mathrm{d}s.\tag{9.45}$$

改变积分与求和的次序，并且用等式

$$u^{\alpha-1}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-su^{\alpha}-s\lambda_n}\mathrm{d}s=\frac{u^{\alpha}-1}{u^{\alpha}+\lambda_n},\tag{9.46}$$

应用逆拉普拉斯变换 $u \to t$，有

$$P(x,t) = \mathrm{e}^{\Phi(x)/2-\Phi(x_0)/2}\sum_n \psi_n(x)\psi_n(x_0)E_\alpha(-\lambda_n t^\alpha), \tag{9.47}$$

其中，$E_\alpha(z)$ 为 Mittag-Leffler 函数. 方程 (9.47) 与分离变量方法得出的解相同.

讨论

(1) $n(s,t)$ 是一个按照 $\int_0^\infty n(s,t)\mathrm{d}s = 1$ 归一化的非负分布密度函数，又因为 $P_1(x,s)$ 和 $n(s,t)$ 都是分布密度函数，那么就容易理解解 (9.33) 式必是归一和非负的.

(2) 基于已知 $l_\alpha(z)$ 的性质，那么 $n(s,t)$ 的性质就能被发现. 例如 $\alpha=1$，$n(s,t)=\delta(s-t)$，这是预期的.

(3) 推导方程 (9.33) 时，假设了自由边界条件. 人们能推广目前的结果到其他类型的边界条件，例如，吸收边界条件，其在飞行时间实验中对反常流的分析是重要的.

(4) 现重新恢复物理单位，利用方程 (9.35)，有

$$P(x,t) = \frac{1}{\alpha}\left(\frac{K_\alpha}{K_1}\right)^{1/\alpha} t\int_0^\infty \frac{1}{t'^{1+1/\alpha}} l_\alpha\left(\frac{K_\alpha^{1/\alpha}t}{K_1^{1/\alpha}t'^{1/\alpha}}\right)P_1(x,t')\mathrm{d}t', \tag{9.48}$$

其中，$P_1(x,t')$ 是对应的正常福克尔–普朗克方程在时间域中的解. 解 $P(x,t)$ 并不依赖于 K_1 的任意选择，而 $P_1(x,t')$ 却明显地与 K_1 有关.

(5) 变换方程 (9.20)、(9.33) 和 (9.48) 具有相同的意义. 这些变换被称为逆莱维变换，其物理意义能从连续时间无规行走理论来理解.

9.3 应用举例

9.3.1 d 维分数阶自由扩散

d 维分数阶扩散方程写为

$$\frac{\partial P(r,t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha}\nabla^2 P(r,t). \tag{9.49}$$

容易将一维结果 (9.33) 式推广到 $d(d>1)$ 维. 对于力自由情况，我们发现

$$P(r,t) = \int_0^\infty n(s,t)\frac{1}{(4\pi s)^{d/2}}\exp\left(-\frac{r^2}{4s}\right)\mathrm{d}s, \tag{9.50}$$

这里已经用到了正常福克尔–普朗克方程的著名高斯解，当然，它是在假设初始坐标在原点的前提下. 应用时间域中的拉普拉斯变换，

$$\hat{P}(r,u) = \frac{u^{\alpha-1}}{(2\pi)^{d/2}}\left(\frac{r}{u^{\alpha/2}}\right)^{1-d/2}\mathrm{K}_{d/2-1}(ru^{\alpha/2}), \tag{9.51}$$

其中，$\mathrm{K}_{d/2-1}$ 代表二阶贝塞尔函数. 对方程 (9.51) 进行逆拉普拉斯变换，基于 Fox H 函数，有

$$P(r,t)=\alpha^{-1}\pi^{-d/2}r^{-d}H_{12}^{20}\left[2^{-2/\alpha}r^{2/\alpha}t^{-1}\Big|_{(d/2,1/\alpha),(1,1/\alpha)}^{(1,1)}\right]. \tag{9.52}$$

长尾 $\xi\equiv r^2/t^\alpha\gg 1$ 行为是

$$P(r,t)\sim k^\alpha r^{-d}\xi^{d/[2(2-\alpha)]}\exp[-\lambda_1\xi^{1/(2-\alpha)}], \tag{9.53}$$

其中，

$$k^\alpha=\pi^{-d/2}2^{-d(2-\alpha)}(2-\alpha)^{-1/2}\alpha^{[\alpha(1+d)/2-1]/(2-\alpha)}, \tag{9.54}$$

$$\lambda_1=(2-\alpha)\alpha^{\alpha/(2-\alpha)}2^{-2/(2-\alpha)}. \tag{9.55}$$

对于 $\xi\ll 1$ 和 $d=3$，$P(r,t)$ 的行为能基于 H 函数的级数展开来显示

$$P(r,t)=\frac{1}{4\pi t^{3\alpha/2}\xi^{1/2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\xi^{n/2}}{n!\Gamma[1-\alpha(1+n/2)]}. \tag{9.56}$$

可以看到对于 $d=3$，$\alpha\neq 1$，当 $r\to 0$，归一化解像 $P(r,t)\sim 1/r$ 那样地发散.

虽然用 Fox H 函数使解向前上了一个台阶，但是计算出数值还比较困难，以致不能得到 $d>1$ 情况的解的显值，所以用积分变换的数值解是一个重要的工具.

9.3.2　偏压分数阶维纳过程

考虑一个一维偏压分数阶扩散过程，其由一个广义扩散系数 K_α 和一个均匀力场 $F(x)=F>0$ 所确定. 对于这种情况，平均位移随时间的增长慢于线性，即

$$\langle x(t)\rangle=\frac{FK_\alpha t^\alpha}{T\Gamma(1+\alpha)}. \tag{9.57}$$

正常福克尔–普朗克方程在 $K_1=1$ 情况下的解是

$$P_1(x,t')=\frac{1}{\sqrt{4\pi t'}}\exp\left[-\frac{(x-Ft'/T)^2}{4t'}\right], \tag{9.58}$$

这描述了一个偏压维纳过程. 对于分数阶情况，用变换 (9.33) 式，可以获得 $P(x,t)$ 在拉普拉斯空间的解

$$\hat{P}(x,u)=\frac{Fu^{\alpha-1}\tau^\alpha}{T\sqrt{1+4(u\tau)^\alpha}}\exp\left\{\frac{F[x-\sqrt{1+4(u\tau)^\alpha}|x|]}{2T}\right\}, \tag{9.59}$$

其中，$\tau^\alpha=T^2/(F^2K_\alpha)$. 对于 $(\tau u)^\alpha\ll 1$，对应于解 $P(x,t)$ 的长时行为，我们发现

$$\hat{P}(x,u)=\begin{cases}\dfrac{F}{T}u^{\alpha-1}\tau^\alpha\exp\left(-\dfrac{F}{T}\tau^\alpha u^\alpha x\right), & x>0;\\[2ex] \dfrac{F}{T}u^{\alpha-1}\tau^\alpha\exp\left[-\dfrac{F}{T}|x|(1+\tau^\alpha u^\alpha)\right], & x\leqslant 0.\end{cases} \tag{9.60}$$

因为 $\int_{-\infty}^{0}\hat{P}(x,u)\mathrm{d}x \sim u^{\alpha-1}$. 按照 Tauberian 理论，$\int_{-\infty}^{0}P(x,t)\mathrm{d}x \sim 1/t^{\alpha}$，所以当 $t\to\infty$，对于 $x<0$，$P(x,t)=0$. 故对方程 (9.60) 做逆拉普拉斯变换，$P(x,t)$ 的渐进行为是

$$\lim_{t\to\infty}P(x,t)=\begin{cases}\dfrac{1}{\alpha A^{1/\alpha}}\dfrac{t}{x^{1+1/\alpha}}l_\alpha\left(\dfrac{t}{A^{1/\alpha}x^{1/\alpha}}\right), & x>0;\\ 0, & x<0,\end{cases} \tag{9.61}$$

其中，$A=(F/T)\tau^{\alpha}$. 对方程 (9.61) 积分，发现对于 $x>0$，有

$$\lim_{t\to\infty}\int_{-\infty}^{x}P(x,t)\mathrm{d}x=1-l_\alpha\left(\frac{t}{A^{1/\alpha}x^{1/\alpha}}\right). \tag{9.62}$$

方程 (9.62) 也能从偏压 CTRW 在 $t\to\infty$ 极限下导出 (Kotulski, 1995). 故在一个线性外场的分数阶福克尔–普朗克方程的解收敛于 CTRW 的长时间极限结果.

在原点，我们用 Tauberian 理论得到分布密度函数长时间后，

$$P(0,t)\sim\frac{A}{\Gamma(1-\alpha)}t^{-\alpha}, \tag{9.63}$$

对于 $F=0$ 情况，像预期的那样，我们发现 $P(0,t)\sim t^{-\alpha/2}$；故有偏压情况下，系统在原点的衰减快于无偏压情况，这是因为粒子漂移远离原点.

按照方程 (9.48)，$\alpha=1/2$ 的解为

$$P(x,t)=\frac{1}{\sqrt{tK_{1/2}^{2}\pi}}\int_{0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{4\pi t'}}\exp\left[-\frac{t'^{2}}{4K_{1/2}^{2}t}-\frac{(x-Ft'/T)^{2}}{4t'}\right]\mathrm{d}t', \tag{9.64}$$

对于大时间，

$$P(x,t)\sim\frac{A}{\sqrt{\pi t}}\exp\left(-\frac{A^{2}x^{2}}{4t}\right),\quad x>0. \tag{9.65}$$

可以看出，精确结果对初始条件存在一个强敏感，$P(x,t)$ 的极大位于 $x=0$ 处. 这不同于正常扩散过程，后者的 $P(x,t)$ 的极大值在 $\langle x(t)\rangle$. 应该说，这里的 FFPE 的解要比 CTRW 简单的多，它涵盖了更加复杂的 CTRW 结果的所有重要特性.

9.3.3 分数阶首次通过时间

1. 线性场

首次通过时间是一个粒子第一次离开一个给定区域的时间. 考虑一个粒子在一维外部线性场 $F(x)=F>0$ 中的漂移，在 $t=0$，粒子位于 $x=0$，吸收边界在

$x = a > 0$，其在数学上意味着 $P(a,t) = 0$. 用正常福克尔–普朗克方程的标准解法，就能发现具有特殊边界的 FFPE 的解，在拉普拉斯空间有

$$\hat{P}(x,u) = \hat{\xi}(x,u) - \mathrm{e}^{Fa/T}\hat{\xi}(x-2a,u), \quad -\infty < x < a, \tag{9.66}$$

其中，

$$\hat{\xi}(x,u) = \frac{Fu^{\alpha-1}\tau^{\alpha}}{T\sqrt{1+4(u\tau)^{\alpha}}}\exp\left\{\frac{F[x-\sqrt{1+4(u\tau)^{\alpha}}|x|]}{2T}\right\}, \tag{9.67}$$

为自由边界条件的 FFPE 的解 [方程 (9.59)].

残余概率 $S(t)$，即粒子直到时间 t 而不到达 a 的概率，其在拉普拉斯空间为

$$\hat{S}(u) = \int_{-\infty}^{a}\hat{P}(x,u)\mathrm{d}x. \tag{9.68}$$

将方程 (9.66) 代入方程 (9.68)，有

$$\hat{S}(u) = \frac{1}{u}\left\{1-\exp\left[\frac{F(1-\sqrt{1+4u^{\alpha}\tau^{\alpha}})a}{2T}\right]\right\}. \tag{9.69}$$

令 t_{f} 为粒子第一次到达 a 所用的随机时间，首次通过时间 (到达 a 的时间) 的分布密度函数是

$$\eta(t_{\mathrm{f}}) = -\frac{\mathrm{d}S(t_{\mathrm{f}})}{\mathrm{d}t_{\mathrm{f}}}, \tag{9.70}$$

或者在拉普拉斯空间，$t_{\mathrm{f}} \to u$，

$$\hat{\eta}(u) = -u\hat{S}(u) + 1. \tag{9.71}$$

用方程 (9.69)，有

$$\hat{\eta}(u) = \exp\left[\frac{F(1-\sqrt{1+4u^{\alpha}\tau^{\alpha}})a}{2T}\right]. \tag{9.72}$$

因为 $\hat{\eta}(u=0) = 1$，$\eta(t_{\mathrm{f}})$ 为一个归一化的分布密度函数. 对于 $F = 0$，利用 $\tau^{\alpha} = T^2/(F^2K_{\alpha})$，结果退化为

$$\hat{\eta}(u) = \exp\left(-\frac{u^{\alpha/2}}{\sqrt{K_{\alpha}}}a\right); \tag{9.73}$$

$\eta(t_{\mathrm{f}})$ 是一个指数为 $\alpha/2$ 的单边莱维稳定密度，所以，对于大 t_{f}，

$$\eta(t_{\mathrm{f}}) \sim \frac{a\alpha}{2\Gamma(1-\alpha/2)\sqrt{K_{\alpha}}}t_{\mathrm{f}}^{-(1+\alpha/2)}. \tag{9.74}$$

对于 $\alpha = 1$ 和 $F = 0$，这里的结果与以前的正常首次通过时间的结果相同. 对于有限 F，用方程 (9.72) 的小 u 行为，去发现 $\eta(t_{\mathrm{f}})$ 的大时间行为. 通过简短的计算，得到

$$\eta(t_{\mathrm{f}}) \sim \frac{aT\alpha}{\Gamma(1-\alpha)FK_{\alpha}}t_{\mathrm{f}}^{-(1+\alpha)}. \tag{9.75}$$

当然，这个公式仅适用于 $\alpha < 1$. 这个行为与 $\alpha = 1$ 和 $F > 0$ 标准情况有很大的不同，后者存在一个指数衰减. $F > 0$ 由方程 (9.75) 确定的衰减要比由方程 (9.74)$F = 0$ 的衰减快，这是因为外场使得粒子朝着吸收边界输运.

2. 非线性场

考虑一个粒子在一维力场 $F(x)$ 中的运动，初始条件为 $\delta(x - x_0)$，吸收边界条件为 $P(a, t) = 0$，这里 $a > x_0$. 逆莱维变换能用来去找出分数阶残余概率 $S_\alpha(t)$ 与对应 $S_1(t)$ 之间的关系. 利用方程 (9.48) 和 $S_\alpha(t) = \int_{-\infty}^{a} P(x,t)\mathrm{d}x$，改变积分次序，我们发现

$$S_\alpha(t) = \frac{1}{\alpha}\left(\frac{K_\alpha}{K_1}\right)^{1/\alpha} t\int_0^\infty \frac{1}{t'^{1+1/\alpha}} l_\alpha\left(\frac{K_\alpha^{1/\alpha}t}{K_1^{1/\alpha}t'}\right) S_1(t')\mathrm{d}t', \tag{9.76}$$

在拉普拉斯空间，

$$\hat{S}_\alpha(u) = \left(\frac{K_1}{K_\alpha}\right) u^{\alpha-1}\hat{S}_1\left(\frac{K_1}{K_\alpha}u^\alpha\right). \tag{9.77}$$

从这个关系可知，如果 $S_1(t)$ 是一个纯粹衰减指数项之和，那么 $S_\alpha(t)$ 就是一个纯粹衰减的 Mittag-Leffler 函数之和. 逃逸时间的分布密度函数 $\eta(t_\mathrm{f})$ 在拉普拉斯空间为

$$\hat{\eta}_\alpha(u) = -u\hat{S}_\alpha(u) + 1, \tag{9.78}$$

利用

$$\hat{\eta}_\alpha(u) = -u^\alpha \frac{K_1}{K_\alpha}\int_0^\infty \exp\left(-u^\alpha\frac{K_1}{K_\alpha}t\right) S_1(t)\mathrm{d}t + 1, \tag{9.79}$$

$$S_1(t) = -\int_0^t \eta_1(t')\mathrm{d}t' + 1 \tag{9.80}$$

和拉普拉斯变换的卷积定理，有

$$\hat{\eta}_\alpha(u) = \hat{\eta}_1(u^\alpha K_1/K_\alpha). \tag{9.81}$$

容易证明方程 (9.72) 和 (9.73) 为方程 (9.81) 的特殊情况.

讨论

因为 $\hat{\eta}_\alpha(u = 0) = \hat{\eta}_1(u = 0)$，所以可能有缺陷的分布密度函数 (即非归一化)$\eta(t_\mathrm{f})$ 的归一化问题与对应的 $\eta_1(t_\mathrm{f})$ 的归一化是等价的. 若在时间间隔 $(0, \infty)$ 存在一个还没有到达边界的有限概率，则 $\eta_1(t_\mathrm{f})$ 不是归一化的. 例如，当力场为负的和线性的，$F(x) = -F < 0$，并且 $x_0 < a$，因此远离边界的方向发生净输运，以致并不是所有粒子能到达点 a. 对于如此有缺陷的情况，考虑残余概率 $S(t)$ 比 $\eta(t_\mathrm{f})$ 更方便.

3. 分数阶 Ornstein-Uhlenbeck 过程

所谓的分数阶 Ornstein-Uhlenbeck(OU) 过程，就是一个试验粒子在一个简谐势中运动. 这种情况不能用 CTRW 以一个直接的方式来分析，因为连续时间无规行走模型仅考虑均匀偏压无规行走.

现考虑 $\alpha = 1/2$ 和 $F(x)/T = -x$，利用正常 OU 过程的著名解

$$P_1(x,s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1-\mathrm{e}^{-2s})}} \exp\left[-\frac{(x-x_0\mathrm{e}^{-s})^2}{2(1-\mathrm{e}^{-2s})}\right]. \tag{9.82}$$

分数阶 OU 过程的解是利用方程 (9.82)，对方程 (9.33) 进行数值积分. 假设初始条件 $x_0 = 1/2$，人们可以看到，解强烈地依赖于初始条件. 在任何时间 t，一个在 $x = x_0$ 的尖头被观察到. 解以一个幂律方式慢地趋于稳定高斯态，而对任何有限时间，解偏离高斯态. 不像正常的 OU 过程，$P(x,t)$ 的极大不是在坐标平均 $\langle x(t)\rangle$ 处，而对于短时间来说，极大位于初始条件给出的位置.

像正常的 OU 过程一样，分数阶 OU 过程有特殊的用途. 正常的 OU 过程描写了两种类型的行为：第一是粒子在简谐势的过阻尼运动；第二是由朗之万方程模型的布朗粒子的速度；后者是克拉默斯方程的基础. 在一个类似的方式上，分数阶 OU 过程描写了一个简谐势中的过阻尼和反常运动；它总是能被用来模拟一个存在莱维行走类型运动的粒子的速度. 分数阶 OU 过程是分数阶克拉默斯方程的基础，这个方程描写的是超扩散，见图 9.1, 而这里的 FFPE 考虑的是欠扩散.

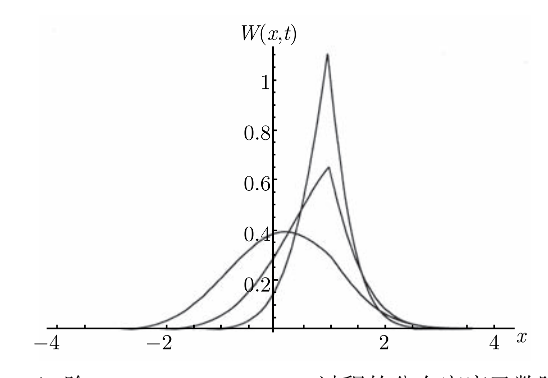


图 9.1　1/2 阶 Ornstein-Uhlenbeck 过程的分布密度函数随时演化

9.4　逆莱维变换与连续时间无规行走的关系

现在基于 CTRW 来讨论逆莱维变换的意义. 非耦合 CTRW 在维数为 d 的空间，描写了这样的一个过程：一个粒子被捕获在原点一段时间 t_1，跳到 r_1，被捕获在 r_1 一段时间 t_2，然后再跳到一个新位置；反复重复. 令 $\psi(t)$ 为成功跳跃之间停

顿时间的分布函数，$f(r)$ 为位移的分布. 假设 $f(r)$ 具有一个有限的方差和零平均.

令 $P(r,t)$ 是发现粒子在 r 处在时间 t 的分布密度函数，$N_{\mathrm{CT}}(s,t)$ 为在时间间隔 $(0,t)$ 内做 s 次跳跃的概率，脚标 CT 代表 CTRW. 因为模型是脱耦的，所以

$$P(r,t)=\sum_{s=0}^{\infty}N_{\mathrm{CT}}(s,t)W(r,s), \tag{9.83}$$

其中，$W(r,s)$ 为粒子经过 s 步后到达 r 处的概率，它一般依赖于 $f(r)$；不过，通常假设在长时间极限后，仅大 s 步的贡献是重要的. 从标准的中心极限定理知

$$W(r,s)\xrightarrow{s\to\infty}G(r,s)=\frac{1}{(4\pi s)^{d/2}}\exp\left(-\frac{r^2}{4s}\right), \tag{9.84}$$

这里用了方便的单位. 因为每步是无关的，所以拉普拉斯变换的卷积定理得出

$$\hat{N}_{\mathrm{CT}}(s,u)=\frac{1-\hat{\psi}(u)}{u}\exp\{s\ln[\hat{\psi}(u)]\}, \tag{9.85}$$

这里 $\hat{N}_{\mathrm{CT}}(s,u)$ 为 $N_{\mathrm{CT}}(s,t)$ 的拉普拉斯变换. 如果 $u\to 0$，$\hat{\psi}(u)\sim 1-u^{\alpha}+\cdots$ [即 $\psi(t)\sim t^{-(1+\alpha)}$]，那么，小 u 极限对应于大 t，

$$\hat{N}_{\mathrm{CT}}(s,u)\sim u^{\alpha-1}\exp(-su^{\alpha}), \tag{9.86}$$

连续时间无规行走的 $\hat{N}_{\mathrm{CT}}(s,u)$ 等价于 FFPE 中的 $\hat{n}(s,u)$. 用一个积分代替方程 (9.83) 中的求和，并且利用方程 (9.84)、(9.86) 和逆拉普拉斯变换，有

$$P(r,t)\sim\int_0^{\infty}n(s,t)G(r,s)\mathrm{d}s. \tag{9.87}$$

这个方程意味着 CTRW 的大时间行为被高斯 $G(r,s)$ 的逆莱维变换所描写. 故当 $F(x)=0$，FFPE 描写了 CTRW 的长时行为，而当 $F(x)\neq 0$，它描写了一个连续时间行走者在外场中的行为.

讨论

(1) 如果分布 $f(r)$ 是宽的，即跳跃长度的方差发散，分数阶黎曼–刘维尔方法并不适用，而取而代之的分数阶空间导数是适宜的.

(2) 从方程 (9.87)，人们看到逆莱维变换具有一个广义大数定律的意义. 当 $\alpha=1$，平均等待时间有限；所以，大数定律成立，我们期待跳跃步数 $s\sim t$. 确实对正常情况，$n(s,t)=\delta(s-t)$. 当 $\alpha<1$，大数定律并不适用，代以跳跃 s 的随机数用分布密度函数 $n(s,t)$ 来描述.

(3) 对于 $r=0$ 和 $d>1$，方程 (9.87) 并不适用,

$$\lim_{r\to 0}P(r,t)\leqslant N_{\mathrm{CT}}(0,t)\delta(r)+\sum_{s=1}^{\infty}\frac{1}{(4\pi s)^{d/2}}. \tag{9.88}$$

CTRW 的精确解

方程 (9.87) 在数学上并不是严格的，现在的目的是检查对一个特殊例子，该方程是否可以很好地被使用. 用已知函数的无限和表示的 CTRW 的精确解与方程 (9.87) 的渐进公式进行比较.

在 $(\boldsymbol{k},u)$ 空间，连续时间无规行走模型的解为

$$\hat{P}(\boldsymbol{k},u)=\frac{1-\hat{\psi}(u)}{u}\frac{1}{1-\hat{\psi}(u)f(\boldsymbol{k})}. \tag{9.89}$$

通常，CTRW 的解是通过对方程 (9.89) 进行数值逆傅里叶–拉普拉斯变换而获得的，或者用蒙特卡罗方法获得. 这里，对一个特殊的 $f(r)$ 和 $\psi(t)$ 的选择，能给出一个 CTRW 的精确解. 假设等待时间的分布密度函数 $\psi(t)$ 为一个单边莱维稳定密度，其拉普拉斯变换为 $\hat{\psi}(u)=\exp(-u^{\alpha})$. 位移分布被设成高斯函数，那么

$$W(r,s)=\frac{1}{(4\pi s)^{d/2}}\exp\left(-\frac{r^2}{4s}\right) \tag{9.90}$$

是精确的，而不仅仅是在渐进情况下. 对于分布密度函数的这种选择，CTRW 的解能够明确地给出. 利用

$$\hat{N}_{\mathrm{CT}}(s,u)=\frac{1-\exp(-u^{\alpha})}{u}\exp(-su^{\alpha}) \tag{9.91}$$

和拉普拉斯变换的卷积定理，有

$$\begin{aligned}N_{\mathrm{CT}}(0,t)&=1-L_{\alpha}(t),\\N_{\mathrm{CT}}(s,t)&=L_{\alpha}\left(\frac{t}{s^{1/\alpha}}\right)-L_{\alpha}\left[\frac{t}{(s+1)^{1/\alpha}}\right],\end{aligned} \tag{9.92}$$

其中，

$$L_{\alpha}(t)=\int_0^t l_{\alpha}(t')\mathrm{d}t'. \tag{9.93}$$

这就是单边莱维稳定分布. 将方程 (9.89) 和 (9.92) 代入方程 (9.83)，得到

$$\begin{aligned}P(r,t)=&[1-L_{\alpha}(t)]\delta(r)+\sum_{s=1}^{\infty}\left\{L_{\alpha}\left(\frac{t}{s^{1/\alpha}}\right)\right.\\&\left.-L_{\alpha}\left[\frac{t}{(s+1)^{1/\alpha}}\right]\right\}\frac{1}{(4\pi s)^{d/2}}\exp\left(-\frac{r^2}{4s}\right).\end{aligned} \tag{9.94}$$

右边第一项描写了在观测时间 t 粒子并不离开原点的无规行走；其他项描写了跳跃数目为 s 的无规行走.

作为一个应用，我们考虑弥散输运. 本节显示 FFPE 与 SM 模型相一致. Scher 和 Montroll① (SM) 用一个具有吸收边界条件的 CTRW，去模型非晶半导体 As_2Se_3

① Scher H, Montroll E. Phys Rev B, 1975, 12: 2455.

的光电导性和有机化合物 TNF-PVK 进行研究，分别发现 $\alpha \simeq 0.5$ 和 $\alpha = 0.8$. 在半导体实验中，空穴被注入一个正电极附近，然后输运到一个负电极，在那里它们被吸收. 实验显示流不符合高斯输运. 在这些飞行时间实验中，暂态电流遵循两种典型的行为

$$I(t) \sim \begin{cases} t^{-(1-\alpha)}, & t < t_r; \\ t^{-(1+\alpha)}, & t > t_r, \end{cases} \tag{9.95}$$

其中，t_r 为暂态时间. 对于高斯输运过程，电荷载流子以一个常速度移动，经过一个暂态时间，其依赖于样品的厚度和外场，电荷载体被吸收. 所以，对大多有序材料中的正常过程，电流有一个阶梯状态. 因为对于不同的样品厚度和外场，归一化的电流 $I(t)/I(t_r)$ 的实验数据随时间 t/t_r 的变化，可以折叠到由方程 (9.95) 描写的一个标度曲线，故现象是普遍的.

SM 显示如何用一个有效中间方法去计算 $\psi(t)$，对许多指数过程求平均. 指数 α 可能依赖于温度和其他控制参数，我们这里将 α 考虑成一个固定的参数. SM 方法用到的基本假设有如下三条：

(1) 电荷载流子被模型为一个一维过程，沿外加的线性场的方向上，$\langle x(t)\rangle \neq 0$；

(2) 在 $x = a$ 具有吸收边界条件，而其他边界条件被忽略. 因为输运是发生在吸收边界的方向，所以这个假设是有道理的；

(3) 所测量的电流正比于粒子的平均速度 $I(t) \propto \langle v(t)\rangle$，$\langle v(t)\rangle$ 为平均位移的时间导数，后者是由一个晶格上的非耦合的 CTRW 计算.

用 FFPE 来描写输运过程,

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha} K_\alpha \left(-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F}{T} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) P(x,t), \tag{9.96}$$

初始条件为 $P(x, t = 0) = \delta(x)$，吸收边界条件 $P(a, t) = 0$. 由于边界条件的存在，$P(x,t)$ 不被归一化，那么 $\langle x(t)\rangle$ 的意义并不是简单的. 想象一个电荷载流子一旦到达边界 a，就被捕获在那里而不再运动，所以

$$\langle x(t)\rangle = \int_{-\infty}^{a} xP(x,t)\mathrm{d}x + [1 - S(t)]a, \tag{9.97}$$

其中，$S(t)$ 是残余概率. 从方程 (9.97) 知：$\langle x(t = 0)\rangle = 0$ 和 $\langle x(t = \infty)\rangle = a$. 方程 (9.97) 右边第一项描写了大多数的散粒过程，而第二项描写了参与过程的粒子数的减少.

前面已经给出了如何计算 $P(x,t)$ 和 $S(t)$，用逆莱维变换，来计算 $\langle x(t)\rangle$ 和 $\langle v(t)\rangle$，也就不太困难了.

基于 $\hat{P}(x,u)$ 和 $\hat{S}(u)$ 的小 u 行为，$\langle x(t)\rangle$ 的行为能被研究清楚. 当 $a \gg T/F$，

有

$$\langle v(t)\rangle = \begin{cases} \dfrac{\alpha F K_\alpha}{T\Gamma(1+\alpha)} t^{-(1-\alpha)}, & t \ll t_r; \\ \dfrac{\alpha a^2 T}{2FK_\alpha \Gamma(1-\alpha)} t^{-(1+\alpha)}, & t \gg t_r, \end{cases} \tag{9.98}$$

这与方程 (9.95) 相类似，这些行为很容易被理解. 对于短时，吸收边界不起作用，$\langle v(t)\rangle$ 为方程 (9.57) 的时间导数；而对于长时间，方程 (9.97) 右端第二项是重要的，利用方程 (9.70) 和 (9.75):

$$\langle v(t)\rangle \sim -a\dot{S}(t) = a\eta(t) \sim t^{-1-\alpha} \tag{9.99}$$

为方程 (9.97) 的散装项，即 $\displaystyle\int_{-\infty}^{a} xP(x,t)\mathrm{d}x$ 总是贡献给流的，且这个贡献是负的.

t_r 的一种方便定义为：令方程 (9.98) 中的两个表达式在 t_r 相等，即短时结果的外延等于长时结果的内推，有

$$t_r = \left[\frac{\Gamma(1+\alpha)}{2\Gamma(1-\alpha)}\right]^{1/2\alpha} \left(\frac{aT}{FK_\alpha}\right)^{1/\alpha}. \tag{9.100}$$

因为 t_r 是可测量的，F、T 和 a 为已知的系统参数，而 α 能从流的斜率来确定，那么 K_α 就可以由实验来确定.

进一步说明逆莱维变换的有效性. 在理想高斯输运系统 ($\alpha = 1$)，平均速度具有一个阶梯行为

$$\langle v_1(t)\rangle = \frac{FK_1}{T}, \quad t < aT/(FK_1); \tag{9.101}$$

其他时间，$\langle v_1(t)\rangle = 0$. 这种行为是一个在正常系统飞行时间实验中观测到的近似阶梯流的简化. 如此理想过程的平均位移为

$$\langle x_1(t)\rangle = \begin{cases} \dfrac{FK_1 t}{T}, & t < aT/(FK_1); \\ a, & t > aT/(FK_1). \end{cases} \tag{9.102}$$

分数阶过程的速度在以下两步中发现:

第一，用逆莱维变换 [方程 (9.48)] 找到 $\langle x(t)\rangle$；

第二，对平均位移进行时间导数而获得 $\langle v(t)\rangle$，结果为

$$\langle v(t)\rangle = \frac{\alpha F K_\alpha}{T} t^{\alpha-1} \int_{t^*}^{\infty} \mathrm{d}z \frac{l_\alpha(z)}{z^\alpha}, \tag{9.103}$$

其中，$t^* = [FK_\alpha/(Ta)]^{1/\alpha} t$ 为问题中的无量纲时间. 对于短时间 t^*，可以将积分的下限取为零; 用 $\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}z l_\alpha(z)/z^\alpha = 1/\Gamma(1+\alpha)$得出的短时行为就是方程 (9.98). 这

个方程中的长时行为也是容易发现的，注意到当 $z \to \infty$，$l_\alpha \sim \alpha z^{-(1+\alpha)}/\Gamma(1-\alpha)$. 特别地，对于 $\alpha = 1/2$，有

$$\langle v(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{FK_{1/2}t^{-1/2}}{T}\left[1-\exp\left(-\frac{T^2a^2}{4F^2K_{1/2}^2t}\right)\right], \tag{9.104}$$

上式为 $\langle v(t)\rangle$ 短时和长时行为的内插.

利用方程 (9.100) 和 (9.103)，可以给出许多实验中观测的流的标度行为:

$$\frac{I(t)}{I(t_r)} = \frac{\langle v(t)\rangle}{\langle v(t_r)\rangle} = F\left(\frac{t}{t_r}\right), \tag{9.105}$$

其中，标度函数为

$$F(x) = x^{\alpha-1}\frac{\displaystyle\int_{c_1x}^{\infty} l_\alpha(z)z^{-\alpha}\mathrm{d}z}{\displaystyle\int_{c_1}^{\infty} l_\alpha(z)z^{-\alpha}\mathrm{d}z}, \tag{9.106}$$

式中，$c_1 = \{\Gamma(1+\alpha)/[2\Gamma(1-\alpha)]\}^{1/\alpha}$. 可见逆拉普拉斯变换方法预言了飞行时间实验的标度函数. 在 CTRW 框架下，标度函数依赖于转变时间 t_r 附近 $\psi(t)$ 的细节.

9.5 分数阶克拉默斯方程

本节将引入一个分数阶克拉默斯方程，其描写一个在外部力场 $F(x) = -V'(x)$ 中存在反常扩散的粒子的速度和坐标的分布密度函数的随时演化. 这个方程写作

$$\frac{\partial P(x,v,t)}{\partial t} + v\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{F(x)}{M}\frac{\partial P(x,v,t)}{\partial v} = \gamma_\alpha\ {}_0D_t^{1-\alpha}\hat{L}_{\mathrm{FP}}P(x,v,t), \tag{9.107}$$

其中，$0<\alpha<1$，无量纲福克尔–普朗克算符为

$$\hat{L}_{\mathrm{FP}} = \frac{\partial}{\partial v}v + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{M}\frac{\partial^2}{\partial v^2}. \tag{9.108}$$

这里使用了黎曼–刘维尔分数阶时间导数算符 ${}_0D_t^{1-\alpha}$. 在力自由情况下，这一方程描写了放大扩散，即超扩散；若势 $V(x)$ 有界，则分数阶克拉默斯方程的稳定解是麦克斯韦–玻尔兹曼分布. 当 $\alpha = 1$，回到标准的克拉默斯方程. 该方程的基础是分数阶 Ornstein-Uhlenbeck 方程，描写这一过程的方程为分数阶福克尔–普朗克方程：

$$\frac{\partial Q(v,t)}{\partial t} = \gamma_\alpha\ {}_0D_t^{1-\alpha}\hat{L}_{\mathrm{FP}}Q(v,t), \tag{9.109}$$

其中，$Q(v,t)$ 为当 $F(x)=0$，在时刻 t 发现粒子具有速度 v 的分布密度函数. 标准的福克尔–普朗克方程所对应的朗之万方程为 $\dot{v} = -\gamma_1 v + \xi(t)$，其中 $\xi(t)$ 为一个高

斯白噪声. 人们将看到分数阶克拉默斯方程为分数阶福克尔–普朗克方程的自然推广，因为只需将描写牛顿演化的流动项加进来即可.

令 $P(x,v,t)$ 为描写一个布朗粒子在外力场 $F(x)$ 中处于位置 x 具有速度 v 的联合密度函数. 一维克拉默斯方程按以下方式来模型化如此随机运动：

$$\frac{\partial P(x,v,t)}{\partial t}+v\frac{\partial P}{\partial x}+\frac{F(x)}{M}\frac{\partial P(x,v,t)}{\partial v}=\gamma_1\hat{L}_{\mathrm{FP}}P(x,v,t). \tag{9.110}$$

这一方程意味着噪声是 “白” 的和高斯的，描写了接近热平衡的欠阻尼运动. 现用以前的方式推广克拉默斯方程到反常扩散情形，即方程 (9.107).

方程 (9.107) 左边的三项表示标准的流动项，按照牛顿第二定律，它们描写了可逆动力学；右边项描写了粒子与热库的相互作用. 这一方程的形式解能基于正常克拉默斯方程的解来给出. 用 $P_\alpha(x,v,t,\gamma_\alpha)$ 代替 $P(x,v,t)$. 方程 (9.107) 的拉普拉斯变换是

$$\begin{aligned}&u\hat{P}_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha)-P_\alpha(x,v,t=0,\gamma_\alpha)+v\frac{\partial\hat{P}_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha)}{\partial x}+\frac{F(x)}{M}\frac{\partial\hat{P}_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha)}{\partial v}\\&=\gamma_\alpha u^{1-\alpha}\hat{L}_{\mathrm{FP}}\hat{P}_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha),\end{aligned} \tag{9.111}$$

这里，$\hat{P}_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha)$ 为 $P_\alpha(x,v,t,\gamma_\alpha)$ 的拉普拉斯变换. 从方程 (9.111) 人们可以看到，在拉普拉斯空间，分数阶方程的解 $P_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha)$ 就像一个正常克拉默斯方程的解一样，只不过阻尼系数需作一个变换

$$\gamma_1\to\gamma_\alpha u^{1-\alpha}, \tag{9.112}$$

所以

$$\hat{P}_\alpha(x,v,u,\gamma_\alpha)=\hat{P}_1(x,v,u,\gamma_\alpha u^{1-\alpha}), \tag{9.113}$$

并且假设两种情况的初始条件是相同的. 再变回到时间域中，则分布密度函数的最终形式为

$$P_\alpha(x,v,t,\gamma_\alpha)=L^{-1}[\hat{P}_1(x,v,u,\gamma_\alpha u^{1-\alpha})], \tag{9.114}$$

其中，L^{-1} 代表逆拉普拉斯变换. 正常克拉默斯方程的闭合解 $P_1(x,v,t,\gamma_1)$ 仅对少数情况是知道的，而近似解用 Risken 著的《福克尔–普朗克方程》一书所详细介绍的方法来获得. 在一些情况下，方程 (9.114) 能被用来发现分数阶克拉默斯方程的矩，即 $\langle x^n v^m\rangle$. 为了方便起见，下面用记号 $P(x,v,t)$ 代替 $P_\alpha(x,v,t,\gamma_\alpha)$.

1. 力自由情况下的一次矩

考虑力自由情况 $F(x)=0$，则方程 (9.107) 左边第三项为零，然后对这个方程两边的 x 积分. 利用自然边界条件：$P(x=\infty,v,t)=P(x=-\infty,v,t)=0$，则积分后方程 (9.107) 左边的第二项消失. 记 $Q(v)=\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}P(x,v,t)\mathrm{d}x$，从而有一个描写分

数阶 OU 过程的分数阶福克尔–普朗克方程:

$$\frac{\partial Q(v,t)}{\partial t} = \gamma_\alpha \ {}_0D_t^{1-\alpha}\left[\frac{\partial}{\partial v}v + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{M}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right]Q(v,t). \tag{9.115}$$

方程 (9.115) 两边乘以 v，并对 v 进行积分，因为 $\langle v(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} vQ(v,t)\mathrm{d}v$，所以就有关于速度平均的分数阶微分方程

$$\langle \dot{v}(t)\rangle = -\gamma_\alpha \ {}_0D_t^{1-\alpha}\langle v(t)\rangle, \tag{9.116}$$

在拉普拉斯空间，有

$$\langle \hat{v}(u)\rangle = \frac{v_0}{u+\gamma_\alpha u^{1-\alpha}}, \tag{9.117}$$

其中，v_0 是初始速度. 对上式进行逆拉普拉斯变换，得到

$$\langle v(t)\rangle = v_0 E_\alpha(-\gamma_\alpha t^\alpha), \tag{9.118}$$

其中，$E_\alpha(z)$ 为 Mittag-Leffler 函数，见附录 A.

像通常那样，$\langle \dot{x}(t)\rangle = \langle v(t)\rangle$，用以上平均速度表达式给出粒子的平均位移:

$$\langle x(t)\rangle = v_0 t E_{\alpha,2}(-\gamma_\alpha t^\alpha), \tag{9.119}$$

这里

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\Gamma(\alpha+\beta n)}, \tag{9.120}$$

是广义 Mittag-Leffler 函数. 对于短时，

$$\langle x(t)\rangle \sim v_0 t, \tag{9.121}$$

正像预期的那样为一个纯粹的弹道传播；对于长时间极限，有

$$\langle x(t)\rangle \sim \frac{v_0 t^{1-\alpha}}{\gamma_\alpha \Gamma(2-\alpha)}. \tag{9.122}$$

粒子存在一个由初始速度 v_0 确定方向上的净漂移. 当然，如果用热平衡条件对初始条件求平均，那么由于对称性的缘故，也就没有净漂移.

方均位移由公式:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x^2(t)\rangle = 2\langle x(t)v(t)\rangle \tag{9.123}$$

来确出. 通过简短的推导，有

$$\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}} = 2\frac{k_{\mathrm{B}}T}{M}t^2 E_{\alpha,3}(-\gamma_\alpha t^\alpha), \tag{9.124}$$

其中，脚标 “eq” 表示热初始条件被用到了，即 $\langle v_0^2\rangle_{\mathrm{eq}} = k_{\mathrm{B}}T/M$. 对于短时，

$$\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}} \sim \frac{k_{\mathrm{B}}T}{M}t^2; \tag{9.125}$$

对于长时极限，

$$\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}} \sim 2D_\alpha t^{2-\alpha}, \tag{9.126}$$

其中，

$$D_\alpha = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{\gamma_\alpha M\Gamma(3-\alpha)}. \tag{9.127}$$

当 $0<\alpha<1$，方程 (9.126) 展示了一种放大扩散. 方程 (9.127) 为第一广义爱因斯坦关系；当 $\alpha=1$，回到著名的爱因斯坦关系 $D_1=k_{\mathrm{B}}T/(M\gamma_1)$.

更一般的爱因斯坦关系也容易被证实，即

$$\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}} = \int_0^t\int_0^t \langle v(\tau_1)v(\tau_2)\rangle_{\mathrm{eq}}\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2 = 2\int_0^t \mathrm{d}t'\int_0^{t'}\mathrm{d}\tau\langle v(\tau)v(0)\rangle_{\mathrm{eq}}, \tag{9.128}$$

速度自相关函数为

$$\langle v(t)v(0)\rangle_{\mathrm{eq}} = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{M}E_\alpha(-\gamma_\alpha t^\alpha). \tag{9.129}$$

现在考虑常量力场 $F(x)=F$ 及分数阶克拉默斯方程 (9.107). 给出连接常量力下的漂移 $\langle x(t)\rangle_F$ 与力自由情况下的方均位移 $\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}}$ 之间的关系，即第二广义爱因斯坦关系:

$$\langle x(t)\rangle_F = F\frac{\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}}}{2k_{\mathrm{B}}T}. \tag{9.130}$$

这个关系意味着分数阶克拉默斯方程与线性响应理论相一致.

2. 力自由情况下的高次矩

在 $F(x)=0$ 情况下，用方程 (9.114) 的形式解去发现偶次矩 $\langle x^{2n}(t)\rangle_{\mathrm{eq}}$，而奇次矩等于零. 考虑在时刻 t 发现粒子在 x 的约化概率密度 $W_{\mathrm{eq}}(x,t)$，其定义为

$$W_{\mathrm{eq}}(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}v\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}v_0 P(x,v,t)M(v_0), \tag{9.131}$$

其中，$P(x,v,t)$ 是分数阶克拉默斯方程的解，$M(v_0)$ 为关于初速度的麦克斯韦分布.

对于标准情况 $\alpha=1$, $W_{\mathrm{eq}}(x,t)$ 是高斯的, 所以

$$\langle x^{2n}(t)\rangle_{\mathrm{eq}} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 W_{\mathrm{eq}}(x,t)\mathrm{d}x = \frac{(2n)!}{2^n n!}\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}}^n, \tag{9.132}$$

其中，

$$\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}} = 2\frac{k_{\mathrm{B}}T}{M}\frac{[\gamma_1 t - 1 + \exp(-\gamma_1 t)]}{\gamma_1^2}, \tag{9.133}$$

仅对 $\alpha=1$，长时间极限给出

$$\langle x^2(t)\rangle_{\mathrm{eq}} \sim 2\frac{k_{\mathrm{B}}T}{M\gamma_1}t. \tag{9.134}$$

按照方程 (9.112)~(9.114)，对于 $0<\alpha<1$ 超扩散情况，$\langle x^{2n}(t)\rangle$ 的计算需要三步.

第一步，发现偶次矩 $\langle x^{2n}(t)\rangle_{\text{eq}}$ 的拉普拉斯变换. 因为人们感兴趣 $\langle x^{2n}(t)\rangle_{\text{eq}}$ 的长时间行为，所以仅考虑标准情况 $\alpha=1$ 的长时行为是足够的，也就是说，用渐进方程 (9.134) 代替方程 (9.133). 容易得到

$$\langle x^{2n}(u)\rangle_{\text{eq}} \sim (2n)!\left(\frac{k_{\text{B}}T}{M\gamma_1}\right)^n \frac{1}{u^{n+1}}, \tag{9.135}$$

这个公式仅适用于小 u 和 $\alpha=1$ 的情形.

第二步，用方程 (9.112) 去变换方程 (9.135).

第三步，对第二步的结果实施逆拉普拉斯变换，就像在方程 (9.114) 那样，我们发现

$$\langle x^{2n}(t)\rangle_{\text{eq}} \sim (2n)!\left(\frac{k_{\text{B}}T}{M\gamma_\alpha}\right)^n \frac{t^{n(2-\alpha)}}{\Gamma(2n-n\alpha+1)}. \tag{9.136}$$

方程 (9.136) 能被用以下的计算来核实

$$\langle x^{2n}(t)\rangle \sim L^{-1}\left\{\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{id}k}\right)^{2n}\left[\frac{u^{1-\alpha}}{u^{2-\alpha}+k_{\text{B}}Tk^2/(M\gamma_\alpha)}\right]\bigg|_{k=0}\right\}, \tag{9.137}$$

这个结果也是预期的.

在傅里叶–拉普拉斯空间，$\alpha=1$ 情况下的解为

$$W_{\text{eq}}(k,u) \sim \frac{1}{u+\dfrac{k_{\text{B}}T}{M\gamma_1}k^2}, \tag{9.138}$$

对这个方程进行 (9.112) 式的变换，得出 $0<\alpha<1$ 情况的解

$$W_{\text{eq}}(k,u) \sim \frac{u^{1-\alpha}}{u^{2-\alpha}+\dfrac{k_{\text{B}}T}{M\gamma_\alpha}k^2}. \tag{9.139}$$

这就是方程 (9.137) 中的矩产生函数. 值得注意的是，一般情况下，$\alpha=1$ 解的小 u 极限被获得后，(9.112) 式的变换并不能保证可行；取而代之的是仅当方程 (9.112) 变换发生后，再作小 u 极限.

按照方程 (9.139)，$W_{\text{eq}}(x,t)$ 满足分数阶扩散方程

$$\frac{\partial W_{\text{eq}}(x,t)}{\partial t} = \frac{k_{\text{B}}T}{M\gamma_\alpha}\,{}_0D_t^{-(1-\alpha)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}W_{\text{eq}}(x,t), \tag{9.140}$$

该方程仅在大时间才适合.

方程 (9.139) 的一维逆拉普拉斯–傅里叶变换为

$$W_{\mathrm{eq}}(x,t) \sim \frac{\sqrt{\gamma_\alpha M}}{\sqrt{2k_{\mathrm{B}}T(1-\alpha/2)}}\left(\frac{z^{2-\alpha/2}}{t^{1-\alpha/2}}\right) l_{1-\alpha/2}(z), \tag{9.141}$$

其中，

$$z = t\left(\frac{\sqrt{k_{\mathrm{B}}T}}{\sqrt{2M\gamma_\alpha}|x|}\right)^{1/(1-\alpha/2)}. \tag{9.142}$$

然而，二维和三维结果并不像一维那样简单.

小结

分数阶福克尔–普朗克方程是一个简单的单一指数的随机框架，其描写了非线性外场中一个接近热平衡的系统的欠扩散输运. 基于对应的正常福克尔–普朗克方程的解，用逆莱维变换可以给出分数阶福克尔–普朗克方程的解. 这种积分变换描述了在维数 $d=1$、2、3 的连续时间无规行走的长时间行为. 故变换实质上是将高斯扩散映射到分数阶扩散，以致扮演着发现分数阶动力学方程的一个工具.

分数阶克拉默斯方程的基本特性为：① 粒子的速度按照分数阶 Ornstein-Uhlenbeck 过程演化；速度矩按照 Mittag-Leffler 弛豫衰减，具体来说，短时为扩展指数函数 (Kohlrausch 形式)，长时幂律形式；② 无力场时，扩散被放大，$1<d<2$；③ 该方程的稳定解是麦克斯韦–玻尔兹曼分布；④ 满足爱因斯坦关系；⑤ 在拉普拉斯空间，正常克拉默斯方程解的一个简单变换可给出分数阶克拉默斯方程的解.

分数阶演化方程与连续时间无规行走密切相关. 这里已显示在小 $(\boldsymbol{k},u)$ 极限，$W_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{k},u)$ 具有与一个特殊耦合莱维行走 CTRW 相同的形式. CTRW 的其他极限对应着分数阶演化方程，例如，描写欠扩散的分数阶扩散方程，对应于在小 $(\boldsymbol{k},u)$ 极限的无耦合 CTRW. 另外的一种分数阶方程能描写 $\langle x^2\rangle=\infty$ 的莱维飞行，如此的分数阶方程与具有发散跳跃长度的 CTRW 无耦合极限相关.

人们可能会问：CTRW 方法是非常成功的，那么引入分数阶导数是否值得？除了分数阶方程是漂亮和简单的事实之外，即在有些情况下是可解的，这些方程能够加入外部势场的效应，然而，在一个外部力场中的反常扩散还知之甚少.

9.6 广义 Chapman-Kolmogorov 方程

Chapman-Kolmogorov 方程描写了一个随机过程从一个给定态到另外一个态通过所有可能的中间态的概率转移，这一方程需要满足马尔可夫条件. 在相空间，Chapman-Kolmogorov 方程写作

$$W(x,v,t+\Delta t)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}(\Delta x)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}(\Delta v)W(x-\Delta x,v-\Delta v,t)\,\varPsi(x-\Delta x,v-\Delta v;\Delta x,\Delta v). \tag{9.143}$$

方程 (9.143) 描写了在平均时间步长 Δt 期间，分布密度函数 $W(x,v,t)$ 从 $W(x-\Delta x, v-\Delta v, t)$ 到 $W(x,v,t+\Delta t)$ 的瞬间演化. 方程 (9.143) 的转移核定义为

$$\Psi(x-\Delta x, v-\Delta v; \Delta x, \Delta v) = \psi(v-\Delta v; \Delta v)\delta(\Delta x - v\Delta t). \tag{9.144}$$

核函数 Ψ 和它的分解成分 ψ 描写了场变量 v 和 x 以时间增加为 Δt 的转移分布，其中位置的增量与平均时间步长 Δt 通过 $\Delta x = v\Delta t$ 相联系.

广义 Chapman-Kolmogorov 方程写作

$$\begin{aligned} W(x,v,t) = & \int_0^t \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(\Delta x) \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(\Delta v) W(x-\Delta x, v-\Delta v, t') \\ & \times \Psi(x-\Delta x, v-\Delta v; \Delta x, \Delta v) w(t-t') + \phi(t) W_0(x,v), \end{aligned} \tag{9.145}$$

其中，$w(t)$ 为等待时间分布密度函数，它控制着任何两次成功跳跃之间所消逝的时间，$W_0(x,v) \equiv \lim\limits_{t\to 0^+} W(x,v,t)$ 是初始条件，初始分布 W_0 以一个暂态衰变振幅 $\phi(t) \equiv 1 - \displaystyle\int_0^t \mathrm{d}t' w(t')$ 持续地对任一时刻的分布密度函数还有贡献，$\phi(t)$ 的含义是直到时间 t 还没有跳跃发生的概率密度. 通过选择特殊的等待时间分布密度函数 $w(t)$ 和转移核 $\Psi(x-\Delta x, v-\Delta v; \Delta x, \Delta v)$，就能给出反常扩散的图像.

9.6.1 布朗运动情况

在布朗运动情况下，Chapman-Kolmogorov 方程 (9.143) 连同转移核属性的定义 (9.144) 式，那么关于位置增量 Δx 的积分能真正积出. 将分布密度函数 W 和核 ψ 展开成 Δv 幂的泰勒级数，那么关于速度变化 Δv 的积分是可以完成的，则最终结果为

$$W(x,v,t) + \Delta t \frac{\partial W}{\partial t} = \left[1 - \langle \Delta v \rangle \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\langle (\Delta v)^2 \rangle}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2}\right] W(x,v,t). \tag{9.146}$$

关于速度增量一次和二次矩需要的信息由朗之万方程给出,

$$m\ddot{x} = -\eta m \dot{x} + F(x) + m\Gamma(t), \tag{9.147}$$

这里，$\Gamma(t)$ 是一个 δ 关联高斯噪声. 可以发现

$$\langle \Delta v \rangle = -\left[\eta v + \frac{F(x)}{m}\right] \Delta t, \quad \langle (\Delta v)^2 \rangle = \frac{\eta k_{\mathrm{B}} T}{m} \Delta t, \tag{9.148}$$

两者均是正比于 Δt.

将方程 (9.146) 与方程 (9.148) 相结合，可以得到关于分布密度函数的动理学 (kinetic) 方程.

1. 克莱因–克拉默斯方程

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\left\{-\frac{\partial}{\partial x}v+\frac{\partial}{\partial v}\left[\eta v-\frac{F(x)}{m}\right]+\frac{\eta k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right\}W(x,v,t), \tag{9.149}$$

这里和下面用到爱因斯坦关系 $K=k_{\mathrm{B}}T/(m\eta)$，这一关系将摩擦系数 η 和扩散系数 K 联系起来. 方程 (9.149) 为一个二变量的福克尔–普朗克方程，其描写了一个质量为 m 的粒子在外场影响下，在相空间 (位置–速度) 的布朗运动. 在方程 (9.149) 的右边，第一项描写了由于粒子的速度而产生的飘移；第二项收集了摩擦和外场通过对应的朗之万方程而反馈到速度；第三项表示速度扩散，即分布密度函数 $W(x,v,t)$ 在短时间内的伸展.

2. 瑞利 (Rayleigh) 方程

无外势情况下 $[F(x)=0]$，相对于方程 (9.149) 而言，速度空间的分布由瑞利方程所产生

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\eta\left(\frac{\partial}{\partial v}v+\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)W(v,t), \tag{9.150}$$

其对应的朗之万方程为 $\dot{v}=-\eta v+\Gamma(t)$. 瑞利方程控制了粒子在速度空间的扩散，也就是被 Ornstein-Uhlenbeck 阻尼项 $\eta(\partial/\partial v)vW(v,t)$ 所限制，对应着朗之万方程中的速度阻尼项 $-\eta v$. 方程 (9.150) 描写了分布密度函数 $W(v,t)$ 朝着稳定麦克斯韦分布的弛豫，平衡分布为

$$W_{\mathrm{st}}=N\exp(-\beta E), \tag{9.151}$$

其中，$\beta=(k_{\mathrm{B}}T)^{-1}, E=mv^2/2$，$N=\sqrt{\beta m/2\pi}$.

3. 斯莫卢霍夫斯基方程

在高阻尼极限下，可以在方程 (9.147) 中忽略惯性项，即 $\dot{x}=F(x)/m\eta+(1/\eta)\Gamma(t)$. 单一变量的福克尔–普朗克方程，通常被称为斯莫卢霍夫斯基方程，为

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{1}{m\eta}\left[-\frac{\partial}{\partial x}F(x)+k_{\mathrm{B}}T\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]W(x,t). \tag{9.152}$$

方程 (9.152) 确定了粒子在外力场影响下在位置空间的扩散. 形式上，方程 (9.152) 的稳定解 W_{st} 仍由方程 (9.151) 定出，不过那里 $E=V(x)$. 当然，它也可以对克莱因–克拉默斯方程的平衡解 $W_{\mathrm{st}}(x,v)$ 中的速度变量进行积分而得出. 然而，从克莱因–克拉默斯方程 (9.149) 转到斯莫卢霍夫斯基方程 (9.152)，出现了附加的“电报项”$(1/\eta)(\partial^2W/\partial t^2)$，它仅在长时间和大摩擦下能被忽略.

9.6.2 速度变量积分

现转向广义 Chapman-Kolmogorov 方程 (9.145). 进一步研究的两个关键要素是等待时间分布 $w(t)$ 和转移核 $\varPsi$. 对于后者，构造此核函数的一般形式

$$\varPsi(x-\Delta x, v-\Delta v;\Delta x,\Delta v)=\psi(v-\Delta v;\Delta v)p(\Delta x|t)w(t), \tag{9.153}$$

其中，前置条件概率 $p(\Delta x|t)$ 将位置增量 Δx 与耗用的等待时间 t 连系起来. 按照连续时间无规行走理论，等待时间分布以及 $p(\Delta x|t)$①，进入在下面的卷积形式：

$$\begin{aligned}W(x,v,t)=&\int_0^t \mathrm{d}t'\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}(\Delta x)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}(\Delta v)W(x-\Delta x,v-\Delta v,t')\psi(v-\Delta v;\Delta v)\\&\times p(\Delta x|t-t')+\phi(t)\delta(x)\delta(v).\end{aligned} \tag{9.154}$$

对于无规行走过程而言，这意味着行走者被粘在一定位置上一段时间，后者是由等待时间分布密度函数中抽取的，或者在一个由 $w(t)$ 确定的随机时间内，被锁定在一个给定的速度模. 此外，初始条件被选为 $W_0(x,v)=\delta(x)\delta(v)$.

一般来讲，广义 Chapman-Kolmogorov 方程描写了一个存在时间卷积的非马尔可夫过程，一种记忆的典型表现. 不过，布朗极限通过选择尖锐的等待时间分布密度函数

$$w(t)=\delta(t-\Delta t), \tag{9.155}$$

而被包含在方程 (9.145) 中. 相联系的条件概率为

$$p(\Delta t|t)=\delta(\Delta x-vt), \tag{9.156}$$

所以，$w(t)p(\Delta x|t)=\delta(t-\Delta t)\delta(\Delta x-v\Delta t)$. 其实，若仅考虑长时间极限，则任何窄的等待时间分布刻画了一个有限特征等待时间

$$T=\int_0^{\infty}tw(t)\mathrm{d}t, \tag{9.157}$$

也就回到了布朗描述.

对广义 Chapman-Kolmogorov 方程中的速度变量进行积分，在改变虚拟变量后，有

$$W(x,t)=\int_0^t\mathrm{d}t'\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'W(x';x-x',t')\varPsi(x';x-x')w(t-t')+\phi(t)W_0(x), \tag{9.158}$$

其等价于广义主方程

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t}=\int_0^t\mathrm{d}t'\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x'W(x',t')K(x-x',x';t-t'), \tag{9.159}$$

① 其实，这里的记法 $p(\Delta x|t)w(t)$ 等价于连续时间无规行走中关于跳跃分布的记法 $\psi(x,t)$.

其中，核函数 $K(x-x',x';t-t')$ 依靠距离 $x-x'$ 和离开的地点 x'. 我们能等价地写 $\Re(x,x';t-t') \equiv K(x-x',x';t-t')$，这里 $\Re$ 定义为

$$\Re(x,x';u) = uw(u)\frac{\Psi(x,x') - \delta(x-x')}{1-w(u)}. \tag{9.160}$$

9.6.3 分数阶瑞利方程

在位置增量 Δx 不是以传统方式分布的条件下，方程 (9.154) 的位置平均能被完成，结果导致一个关于 $W(v,t)$ 的单变量广义 Chapman-Kolmogorov 方程

$$W(v,t) = \int_0^t \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(\Delta v) W(v-\Delta v,t')\psi(v-\Delta v;\Delta v)w(t-t') + \phi(t)\delta(v). \tag{9.161}$$

用前面已经提及的泰勒展开到速度的二阶项，求出附属的积分，则

$$W(v,t) = \int_0^t \mathrm{d}t' \left[1 - \frac{\partial}{\partial v}\langle \Delta v\rangle + \frac{\langle(\Delta v)^2\rangle}{2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right] W(v,t')w(t-t') + \phi(t)\delta(v). \tag{9.162}$$

现考虑一个单边莱维稳定等待时间分布密度函数，$w(t) = L_\alpha^+(t/\tau)$，或者一个长尾形式：

$$w(t) \sim \frac{A_\alpha}{t^{1+\alpha}}, \quad 0 < \alpha < 1, \tag{9.163}$$

其对应于一个发散的特征 (平均) 等待时间 T，这是由于很长的等待时间相对频繁地出现. 若合适地选择常数 A_α，则在拉普拉斯空间，$w(u) = \int_0^\infty w(t)\exp(-ut)\mathrm{d}t$. 分布密度函数显现出以下的渐进行为

$$w(u) \sim 1 - (u\tau)^\alpha. \tag{9.164}$$

称 τ 或者 τ^α 为内禀等待时间尺度，即将其当作等待时间过程的标度单位.

需要在方程 (9.162) 求出 Δv 的前两次矩，在自由场情况下，它们为

$$\langle \Delta v\rangle = -\eta v\tau^*, \quad \langle(\Delta v)^2\rangle = \frac{2k_\mathrm{B}T\eta}{m}\tau^*, \tag{9.165}$$

其中，τ^* 为相互作用时间常量. 下面将对它作评论.

联合 (9.162)、(9.164) 和 (9.165) 三式，得到在拉普拉斯空间方程的解：

$$W(v,u) = \left(1 + \frac{\partial}{\partial v}\eta v\tau^* + \frac{k_\mathrm{B}T\eta}{m}\tau^*\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right) W(v,u)w(u) + \phi(u)\delta(v). \tag{9.166}$$

注意 $\phi(u) = [1-w(u)]/u$，$O(\tau^{2\alpha})$ 项已被忽略，获得方程：

$$W(v,u) - \frac{W_0(v)}{u} = u^{-\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial v}v + \frac{k_\mathrm{B}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)\eta^* W(v,u), \tag{9.167}$$

其中，

$$\eta^* \equiv \eta \frac{\tau^*}{\tau^\alpha}, \quad [\eta^*] = \mathrm{s}^{-\alpha}. \tag{9.168}$$

方程 (9.167) 右边包含 $u^{-\alpha}W(v,u)$ 的逆拉普拉斯变换能被完成，这需要考虑黎曼–刘维尔分数阶积分的定义

$${}_0D_t^{-\alpha}W(v,t) \equiv \frac{1}{\Gamma(\alpha)}\int_0^t \mathrm{d}t' \frac{W(v,t')}{(t-t')^{1-\alpha}}, \tag{9.169}$$

对之实施拉普拉斯变换，有

$$L\{{}_0D_t^{-\alpha}W(v,t)\} \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}t \exp(-ut){}_0D_t^{-\alpha}W(v,t) = u^{-\alpha}W(v,u). \tag{9.170}$$

再对方程 (9.167) 进行逆拉氏变换，得到

$$W(v,t) - W_0(v) = {}_0D_t^{-\alpha}\eta^* \left(\frac{\partial}{\partial v} + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right) W(v,t), \tag{9.171}$$

利用分数阶微分算符的定义

$${}_0D_t^{1-\alpha} \equiv \frac{\partial}{\partial t}{}_0D_t^{-\alpha}, \tag{9.172}$$

方程 (9.171) 重新写成

$$\frac{\partial W}{\partial t} = {}_0 D_t^{1-\alpha}\eta^* \left(\frac{\partial}{\partial v}v + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right) W(v,t), \tag{9.173}$$

这就是分数阶瑞利方程，其实它是 OU 过程的分数阶推广.

讨论

(1) 在 $\alpha \to 1$ 情况下，方程 (9.173) 退化为布朗瑞利方程 (9.150). 这是因为等待时间分布 $w(t)$ 退回到 δ 形式，那么特征等待时间 $T = \tau = \Delta t$. 在长时间极限，对泊松形式 $w(t) = \tau^{-1}\exp(-t/\tau)$ 或者任何有限的平均等待时间 T 而言，也有同样的结论.

(2) 分数阶瑞利方程确定的速度矩能够通过积分，直接由方程 (9.173) 计算. 对于 $\langle v(t)\rangle$，有分数阶弛豫方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle v(t)\rangle + {}_0D_t^{1-\alpha}\eta^*\langle v(t)\rangle = 0, \tag{9.174}$$

对之实施拉普拉斯变换，得到该空间的解

$$\langle v(u)\rangle = \frac{v_0}{u + \eta^* u^{1-\alpha}}. \tag{9.175}$$

基于 Mittag-Leffler 函数，将上式变回到时间域，有

$$\langle v(t)\rangle = v_0 E_\alpha(-\eta^* t^\alpha) \equiv v_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\eta^* t^\alpha)^n}{\Gamma(1+\alpha n)}, \tag{9.176}$$

这里的 Mittag-Leffler 函数是指数函数的自然推广. 对于 $0<\alpha<1$，它是严格单调的，且介于初始的扩展指数样式

$$\langle v(t)\rangle \sim v_0 \exp\left[-\frac{\eta^* t^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)}\right] \tag{9.177}$$

和最终的倒幂律衰减

$$\langle v(t)\rangle \sim [\eta^* t^\alpha \Gamma(1-\alpha)]^{-1} \tag{9.178}$$

之间.

分数阶瑞利过程的速度二次矩显示 Mittag-Leffler 弛豫，即

$$\langle v^2(t)\rangle = v_0^2 E_\alpha(-2\eta_\alpha t^\alpha) + \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}[1-\exp(-2\eta_\alpha t^\alpha)], \tag{9.179}$$

其朝着稳定热平衡值 $\langle v^2\rangle_{\mathrm{th}} = k_{\mathrm{B}}T/m$ 渐进.

(3) 考查速度矩的 Mittag-Leffler 弛豫，其模接近于拉普拉斯空间的标度

$$W_\alpha(v,u) = \frac{\eta}{\eta^*} u^{\alpha-1} W_1\left(v, \frac{\eta}{\eta^*} u^\alpha\right), \tag{9.180}$$

这里，分数阶瑞利方程 (9.173) 拉普拉斯空间的完全解用 $W_\alpha(v,u)$ 标记，而布朗瑞利方程 (9.150) 的解用 $W_1(v,u)$ 表示. 因为分数阶方程的解是正定的，所以布朗过程的指数弛豫能变成 Mittag-Leffler 样式，与 (9.175) 式比较，类似地有

$$L[v_0 \exp(-\eta t)] = \frac{v_0/\eta}{1+u/\eta} \to \frac{v_0}{1+\eta^* u^{1-\alpha}}. \tag{9.181}$$

小结

所有由广义 Chapman-Kolmogorov 方程刻画的过程，若等待时间分布密度函数具有 (9.163) 式的宽分布形式，其特征等待时间发散，不管什么样条件的概率 $p(\Delta x|t)$，都导致一个 Mittag-Leffler 函数型的朝着麦克斯韦分布演化的平衡. 在这个意义上，Mittag-Leffler 弛豫给出了一个此类型的反常输运的普适特性：具有标度自由和自相似的等待时间分布密度函数.

9.7 捕获所产生的慢输运过程

9.7.1 分数阶克莱因–克拉默斯方程

本节将自由场中欠扩散 $(0<\alpha<1)$ 的位置空间动力学包括进来. 这个过程对应于多重捕获事件，而粒子按白噪声驱动的朗之万方程 (9.147) 描写的布朗类型移

动，然后成功地在一个陷阱得到固定，平均距离为 $\Delta = \sqrt{\langle v^2\rangle_{\rm th}}\tau^*$. 只要假设捕获是强的，那么消耗在固定态的时间就遵守稳定等待时间分布密度函数 (9.163) 式.

这个过程用以下的条件概率来模型，

$$p(\Delta x|t) \equiv p(\Delta x) = \delta(\Delta x - v\tau^*), \tag{9.182}$$

这是一个脱耦表示，即 p 并不明显地包括等待时间，仅对短时间才有 $p = \delta(\Delta x - vt)$.

描写这一过程的广义 Chapman-Kolmogorov 方程为

$$\begin{aligned} W(x,v,t) = &\int_0^t {\rm d}t' \int_{-\infty}^{\infty} {\rm d}(\Delta v) W(x - v\tau^*, v - \Delta v, t')\psi(v - \Delta v; \Delta v) w(t - t') \\ &+ \phi(t)\delta(x)\delta(v). \end{aligned} \tag{9.183}$$

只要对应的平均被确定，速度增量的积分就能被完成. 当捕获事件被朗之万控制过程所中断，但动能还被保留，粒子速度的一次和二次矩为

$$\langle \Delta v \rangle = -\eta v \tau^* + \frac{F(x)}{m}\tau^*; \quad \langle (\Delta v)^2 \rangle = 2\frac{k_{\rm B}T\eta}{m}\tau^*, \tag{9.184}$$

其中，τ^* 为两次成功捕获事件之间的平均时间. 对 Δv 积分后，有

$$\begin{aligned} W(x,v,u) = &\left[1 - v\tau^*\frac{\partial}{\partial x} - \frac{F(x)}{m}\tau^*\frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial}{\partial v}\eta v\tau^* + \frac{k_{\rm B}T\eta}{m}\tau^*\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right] W(x,v,u)w(u) \\ &+ \frac{1 - w(u)}{u} W_0(x,v), \end{aligned} \tag{9.185}$$

重组一些项并变换到 t 空间，我们获得分数阶克莱因–克拉默斯方程：

$$\frac{\partial W}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha}\left[-v^*\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial v}\left(\eta^* v - \frac{F(x)}{m}\right) + \frac{\eta^* k_{\rm B}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right] W(x,v,t), \tag{9.186}$$

其中，$v^* = v\tau^*/\tau^\alpha$ $([v^*] = {\rm cm}\cdot{\rm s}^{-\alpha})$，$\eta^* = \eta\tau^*/\tau$ $([\eta^*] = {\rm s}^{-\alpha})$，$F^*(x) = F(x)\tau^*/\tau^\alpha$ $([F^*] = {\rm cm}\cdot{\rm g}\cdot{\rm s}^{-1-\alpha})$. 注意标准的克莱因–克拉默斯方程中的斯托克斯 (Stokes) 算符 $(\partial/\partial t + v\partial/\partial x)$ 被算符 $(\partial/\partial t + {}_0D_t^{1-\alpha} v^*\partial/\partial x)$ 所替代，以致显示非局域飘移响应.

讨论 A

在分数阶克莱因–克拉默斯方程 (9.186) 中，方括号内的全部克莱因–克拉默斯算符在时间域上扮演着非局域化，即漂移、摩擦和扩散项是在时间卷积之内，因而被记忆影响着. 结果产生 (x,v) 空间的平均位置 $\langle x(t)\rangle$，通过非牛顿关系与粒子的速度相联系:

$$\frac{\rm d}{{\rm d}t}\langle x(t)\rangle = \frac{\tau^*}{\tau^\alpha}{}_0D_t^{1-\alpha}\langle v(t)\rangle, \tag{9.187}$$

这看起来与布朗关系 ${\rm d}/{\rm d}t\langle x(t)\rangle = \langle v(t)\rangle$ 不符. 这种“违背”的结果完全是由于引入长尾等待时间分布密度函数 $w(t)$ 的伪装效应. 朗之万方程 (9.147) 的确产

生了莱维寄生过程的非捕获区域，对噪声平均后的方程完全与牛顿定律一样：$m(\mathrm{d}^2/\mathrm{d}t^2)\langle x(t)\rangle = -\eta\langle v(t)\rangle + F(x)$. 对捕获和非捕获时间序列的平均是单独进行的，再加上由于长尾等待时间分布密度函数 (9.163) 式的捕获区域占主导性，所以带来 (9.187) 式的行为.

此外，分数阶克莱因–克拉默斯方程 (9.186) 是可分离的，那么分离变量方法将使该方程脱耦成一个瞬间和一个空间本征解，故在莱维寄生问题中，分数阶克莱因–克拉默斯模弛豫允许 Mittag-Leffler 式样.

只要在方程 (9.186) 描写的多重捕获过程中，动能假设是守恒的，由于摩擦，即粒子与环境的有效相互作用引起的摩擦项：$-\eta v\tau^*$，同等待时间一样遵守分布密度函数 (9.163) 式，那么自由粒子速度的分布密度函数 $W(v,t)$ 的平衡性就可由分数阶瑞利方程 (9.173) 描写.

讨论 B

现在转向 FKKE(9.186) 的过阻尼极限. 用与布朗情况相同的步骤，对 FKKE (9.186) 进行速度积分 $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}v$, 并且用 v 乘以方程 (9.186)，然后完成 $\int_{-\infty}^{\infty}v\mathrm{d}v$ 积分，导致两个独立的方程. 两者相结合给出动能方程

$$\frac{\partial W}{\partial t} + {}_0D_t^{1+\alpha}\frac{1}{\eta^*}W = {}_0D_t^{1-\alpha}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{m\eta_\alpha} + K_\alpha\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)W(x,t). \tag{9.188}$$

在高摩擦 ($\eta^* \to \infty$) 极限下，以上方程变为分数阶福克尔–普朗克方程

$$\frac{\partial W}{\partial t} = {}_0D_t^{1-\alpha}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{m\eta_\alpha} + K_\alpha\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)W(x,t). \tag{9.189}$$

上述方程也可以从广义主方程和非均匀随机行走模型推导出. 常量 η_α 和 K_α 定义为

$$\eta_\alpha = \frac{\eta\tau^\alpha}{\tau^*}, \quad [\eta_\alpha] = \mathrm{s}^{\alpha-2};$$
$$K_\alpha = \frac{k_\mathrm{B}T}{m\eta_\alpha}, \quad [K_\alpha] = \mathrm{cm}^2\cdot\mathrm{s}^{-\alpha}. \tag{9.190}$$

这表明广义扩散系数是以合适的动力学量 η_α、m、τ^* 和 τ^α，换句话说，是通过引入等待时间分布 (9.163) 式来确定的. 此外，联系 K_α 与 η_α 的广义爱因斯坦–斯托克斯关系在推导中也直接给出.

FFPE(9.189) 的解与布朗运动的分布密度函数存在以下的标度关系：

$$W_\alpha(x,u) = \frac{\eta_\alpha}{\eta}u^{\alpha-1}W_1\left(x, \frac{\eta_\alpha}{\eta}u^\alpha\right), \tag{9.191}$$

这与分数阶Ornstein-Uhlenbeck过程等价. 因此，FFPE(9.189)的模弛豫也为 Mittag-Leffler 样式：$T_n(t) = E_\alpha(-\lambda_\alpha t^\alpha)$，这与相应的 FKKE(9.186) 是相同的.

自由场中粒子的方均位移写作

$$\langle x^2(t)\rangle = \frac{2K_\alpha}{\Gamma(1+\alpha)}t^\alpha, \tag{9.192}$$

其中，$K_\alpha^* = K_\alpha/\Gamma(1+\alpha)$，$0<\alpha<1$.

9.7.2 莱维行走及其推广：具有莱维型轨道的放大输运

本节研究广义 Chapman-Kolmogorov 框架与连续时间无规行走理论所确定的莱维行走的关系. 按照后者，一个莱维行走由跳跃分布密度函数 $\psi(x,t)=p(x|t)w(t)$ 产生，其定出了随机行走过程的跳跃步长和等待时间. 条件概率 $p(x|t)$ 引入了一个时间花费，表明长的跳跃要付出一个高时间花费的代价. 这个显著的不同意味着莱维行走过程远离了马尔可夫莱维飞行. 前者存在一个有限的方均位移，以致表达了一个关于重质量粒子的具有物理直觉的理论，而后者出现了发散的二次矩. 找出广义 Chapman-Kolmogorov 方程与莱维行走的联系是令人感兴趣的，例如，相空间的表述. 原则上，这种莱维行走模型允许推广到非传统速度分布和存在外势场的情况. 这里，集中于空间与瞬间的耦合是线性的，即 $p(x|t)=\delta(x-vt)$，但下面的推导能被扩展到一般耦合情况.

从广义 Chapman-Kolmogorov 方程 (9.154) 出发，选择 δ 耦合

$$p(\Delta x|t) = \frac{1}{2}\delta(|x|-v_0t), \tag{9.193}$$

人们需要考虑尖锐的速度分布，那么这里的绝对值就是需要的，

$$\psi(v-\Delta v;\Delta v) = \delta(\Delta v - v_0), \tag{9.194}$$

也就是说，若选择

$$W_0(x,v) = \delta(x)\delta(v-v_0). \tag{9.195}$$

则粒子就没有发生外观上的速度变化，这已通过选择方程 (9.193) 将之表达了.

对速度增量 Δv 和速度 v 积分后，有

$$\begin{aligned}W(x,t) = &\int_0^t \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(\Delta x) W(x-\Delta x,t')\frac{1}{2}\delta(|\Delta x| - v_0(t-t'))w(t-t') \\ &+\phi(t)\delta(x),\end{aligned} \tag{9.196}$$

经过卷积变量和虚拟变量 Δx 的变化后，以上方程重新改成

$$W(x,t) = \int_0^t \mathrm{d}t' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' W(x',t')\psi(x-x',t-t') + \phi(t)\delta(x), \tag{9.197}$$

其中，跳跃分布密度函数是

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2}\delta(|x|-v_0t)w(t). \tag{9.198}$$

这精确地与莱维行走的定义相等价.

对于具有有限特征时间 T，但发散的二次矩的等待时间分布密度函数，例如，

$$w(t)\sim\frac{A_\beta}{t^{1+\beta}},\quad 1<\beta<2, \tag{9.199}$$

则相应的方均位移为

$$\langle x^2(t)\rangle\propto t^{3-\beta}, \tag{9.200}$$

其描写了欠弹道超扩散，但并不与莱维飞行中已讨论过的标度结果相混淆.

莱维行走中的一个引人瞩目的量是轨道，其与真正的莱维飞行相似. 对后者，每次跳跃的长度都是按二次矩发散的莱维稳定方式分布的. 这种相似性来自于这样的事实：增加时间则允许在莱维行走模型中的跳跃长度窗口增大，即长跳跃与对之的代价时间之间的相关性很小.

对应于莱维行走的 Chapman-Kolmogorov 方程 (9.197) 的动理学方程的计算并不像莱维寄生情况那样简单，由于取得了非常长的逗留，造成一个长尾分布密度函数. 正像下面所显示的那样，禁止对傅里叶空间的展开进行切断，在连续时间无规行走中也是如此，但是仅对一次和二次矩的计算可以这样做，而对计算相应的分布密度函数是允许的. 另外，傅里叶展开的所有项都得保留.

9.7.3 莱维漫游：在小波数极限下的欠弹道游动

本节引入一个新的过程，它精确地从傅里叶表述的小波数极限获取，而并不与莱维行走相当. 在这个过程中，粒子被假设停留固定在一个传播模，但它的漂移长度被截断. 我们讨论的是欠弹道扩散，在外力场中的放大输运，并且具有有限矩的一个有趣的情形. 特别是，*这个过程更接近波动方程而不是扩散方程*. 物理上，它属于理查森 (Richardson) 扩散.

莱维漫游的基本定义是与莱维行走非常相似的，即具有一个明显的 (9.193) 式的空间瞬间耦合. 进一步确定速度增量的矩为

$$\langle\Delta v\rangle=-\eta v\tau^*+\frac{F(x)}{m}t;\quad \langle(\Delta v)^2\rangle=2\frac{k_{\mathrm{B}}T\eta}{m}\tau^*, \tag{9.201}$$

只要力不断地作用在试验粒子上，利用这个定义，我们假设摩擦和熵的影响通过有效相互作用时间 τ^* 来进入. 选择一个具有发散方均位移的长尾等待时间分布，有限的 τ^* 成为可以忽略的小量，故能表达成点相互作用. 与一个碰撞的物理图像相比较，以上的假设是有物理意义的.

将所有的因素考虑在一起，得出一个广义 Chapman-Kolmogorov 方程：

$$W(x,v,t)=\int_0^t \mathrm{d}t'\left(1+\frac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}v}\eta v\tau^*-\frac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}v}\frac{F(x)}{m}(t-t')+\frac{k_{\mathrm{B}}T\eta}{m}\tau^*\frac{\bar{\partial}^2}{\bar{\partial}v^2}\right)$$
$$\times W(x-v(t-t'),v,t')w(t-t')+\phi(t)\delta(x)\delta(v), \tag{9.202}$$

其中，算符 $\bar{\partial}/\bar{\partial}v$ 单独地作用在 $W[x-v(t-t'),v,t']$ 的第二个自变量上. 为了进一步演化，对以上方程实施傅里叶变换，有

$$W(k,v,t)=\int_0^t \mathrm{d}t'\left[1+\frac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}v}\eta v\tau^*-\frac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}v}\frac{F(x)}{m}(t-t')+\frac{k_{\mathrm{B}}T\eta}{m}\tau^*\frac{\bar{\partial}^2}{\bar{\partial}v^2}\right]W(k,v,t')$$
$$\times \mathrm{e}^{\mathrm{i}kv(t-t')}w(t-t')+\phi(x)\delta(v), \tag{9.203}$$

注意到力 F 实际上将写成与 W 的傅里叶卷积. 在等式右边还用到了傅里叶变换的平移理论：$f(x-a)\to \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}f(k)$；再用拉普拉斯变换的等价性原理，得出如下的方程

$$W(k,v,u)=\left(1+\frac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}v}\eta v\tau^*+\frac{\bar{\partial}^2}{\bar{\partial}v\bar{\partial}u}\frac{F}{m}+\frac{k_{\mathrm{B}}T\eta}{m}\tau^*\frac{\bar{\partial}^2}{\bar{\partial}v^2}\right)$$
$$\times W(k,v,u)w(u-\mathrm{i}kv)+\phi(u)\delta(v), \tag{9.204}$$

其中，$\dfrac{\bar{\partial}}{\bar{\partial}u}$ 单独作用在函数 $w(u-\mathrm{i}kv)$，业已使用了定理：$tg(t)\to(\mathrm{d}/\mathrm{d}u)g(u)$.

在这一点上，通过以下近似引入小波数极限，

$$\begin{aligned}w(u-\mathrm{i}kv)&\sim 1-(u\tau)^{\alpha}|_{u-\mathrm{i}kv}\\&=1-(u\tau)^{\alpha}\left(1-\frac{\mathrm{i}kv}{u}\right)^{\alpha}\sim 1-(u\tau)^{\alpha}\left(1-\alpha\frac{\mathrm{i}kv}{u}\right)\\&\sim w(u)+\alpha\tau^{\alpha}\mathrm{i}kvu^{\alpha-1},\end{aligned} \tag{9.205}$$

这里终止了 k 的一阶项后的所有项. 此外，需详细说明在长时间下 (即小波数极限)，哪些项将被接受. 用方程 (9.204) 括号中的算符乘以方程 (9.205)，取方程 (9.205) 中的两项连同“1”一起，而所有在圆括号内的剩余项与 $w(u)$ 相结合，观察可见，被忽略的是与波数 k 结合相关的高阶项以及对应的关于速度的傅里叶量.

显然

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}w(u)=-\alpha\tau^{\alpha}u^{\alpha-1}+O(\tau^{2\alpha}), \tag{9.206}$$

则方程 (9.204) 可重新写成

$$W(k,v,u)=\left[w(u)+\alpha\tau^{\alpha}\mathrm{i}kvu^{\alpha-1}+w(u)\frac{\partial}{\partial v}\eta v\tau^*+\alpha\tau^{\alpha}u^{\alpha-1}\frac{F}{m}\frac{\partial}{\partial v}\right.$$
$$\left.+w(u)\frac{k_{\mathrm{B}}T\eta\tau^*}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right]W(k,v,u)+\frac{1-w(u)}{u}\delta(v). \tag{9.207}$$

利用通常的微分定理 $\mathrm{i}kf(k) \to -(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)f(x)$，发现莱维漫游的分数阶克莱因–克拉默斯方程的积分形式为

$$\begin{aligned}&W(x,v,t)-W_0(x,v)+\alpha_0 D_t^{-1}\left(v\frac{\partial}{\partial x}+\frac{F(x)}{m}\frac{\partial}{\partial v}\right)W(x,v,t)\\&={}_0D_t^{-\alpha}\eta^*\left(\frac{\partial}{\partial v}v+\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)W(x,v,t),\end{aligned}\tag{9.208}$$

以上方程两边对时间 t 微分，得到微分形式:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial W}{\partial t}+\alpha v\frac{\partial W}{\partial x}+\alpha\frac{F(x)}{m}\frac{\partial W}{\partial v}\\&={}_0D_t^{1-\alpha}\eta^*\left(\frac{\partial}{\partial v}v+\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)W(x,v,t).\end{aligned}\tag{9.209}$$

经过一个位置变量 $(x \to x/\alpha)$ 和力 $(F \to \alpha F)$ 的重新标度，得出莱维漫游 FKKE 的最后形式:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial W}{\partial t}+v\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{F(x)}{m}\frac{\partial W}{\partial v}\\&={}_0D_t^{1-\alpha}\eta^*\left(\frac{\partial}{\partial v}v+\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\right)W(x,v,t).\end{aligned}\tag{9.210}$$

讨论A 描写莱维漫游的 FKKE

方程 (9.210) 的稳定解通过 $\partial W/\partial t = 0$ 来获得，即以下两个方程必须同时成立:

$$v\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{F(x)}{m}\frac{\partial W}{\partial v}=0;\tag{9.211}$$

$$\frac{\partial(vW)}{\partial v}+\frac{k_\mathrm{B}T}{m}\frac{\partial^2 W}{\partial v^2}=0.\tag{9.212}$$

这是因为一个常数的分数阶微分 ${}_0D_t^{1-\alpha}1 \propto t^{\alpha-1}$，此即表明如果分数阶导数右边是一个非零的时间无关常量，那么经它作用后将是时间有关的. 基于分离变量 $W_\mathrm{st}(x,v)=X(x)V(v)$，发现方程 (9.210) 的稳定分布是吉布斯–玻尔兹曼形式.

故分数阶克莱因–克拉默斯方程支配着朝着吉布斯–玻尔兹曼平衡的弛豫，因而它不同于莱维飞行或者莱维行走所给出的非平衡稳定解. 此外，分布密度函数 $W(x,v,t)$ 为指数衰减，以致位置空间的轨道也不是莱维类型的. 由于它的求导，将方程 (9.210) 左边的漂移项从右边的摩擦和扩散项中分离出来，而后者是在分数阶算符作用下的，宏观平均仍具有牛顿特性，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x(t)\rangle=\langle v(t)\rangle.\tag{9.213}$$

显然，FKKE(9.210) 与 FKKE(9.186) 不同. 对于后者而言，类似的关系方程 (9.187) 突出了由伪装的等待时间平均所带来的非牛顿特性，其中宽分布捕获时间与朗之

万的非捕获运动的竞争中占了主导地位. 那些事件的单体持续了有限的平均时间 τ^*. 这里遇到了不同的情况，按照假设，粒子不曾被捕获，而是频繁地对外部力场 $F(x)$ 作出反应，这体现在矩方程 (9.201). 显然，这个行为是存在于小波数极限 (9.205) 式的处理之中.

讨论B 莱维漫步者的分数阶福克尔–普朗克方程

对方程 (9.210) 进行速度积分，获得分数阶电报型 (时间导数为二阶) 方程

$$\frac{1}{\eta^*}{}_0D_t^{2+\alpha}W+\frac{\partial^2}{\partial t^2}W={}_0D_t^{\alpha}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{m\eta^*}+K_{2-\alpha}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)W(x,t), \tag{9.214}$$

式中，广义扩散系数为

$$K_{2-\alpha}=\frac{k_{\rm B}T}{m\eta^*},\quad [K_{2-\alpha}]={\rm cm}^2\cdot{\rm s}^{\alpha-2}. \tag{9.215}$$

对于短时间，这个过程通过下列方程来产生

$$\frac{1}{\eta^*}\frac{\partial^2}{\partial t^2}W=\left[-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{m\eta^*}+K_{2-\alpha}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]W(x,t), \tag{9.216}$$

突出的是当速度发生变化之前出现了弹道运动，这时粒子沿着它原来的方向运动. 这在自由场中是显而易见的，那么方程 (9.216) 退化为波动方程

$$\frac{\partial^2 W}{\partial t^2}=\tilde{v}\frac{\partial^2}{\partial x^2}W(x,t), \tag{9.217}$$

其中，$\tilde{v}=\eta^*K_{2-\alpha}$. 注意这种行为也能从莱维潜行模型中消除长时间极限后而获得.

在通常的强摩擦极限下，我们发现分数阶福克尔–普朗克方程

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}W={}_0D_t^{\alpha}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{m\eta^*}+K_{2-\alpha}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)W(x,t). \tag{9.218}$$

注意左边的二阶时间导数预示着它本质上是一个欠弹道运动. 在这个模型中，FKKE (9.210) 和 FFPE(9.218) 的广义扩散系数均由 η^* 给出. 属于方程 (9.218) 的自由方均位移为

$$\langle x^2(t)\rangle=\frac{2K_{2-\alpha}}{\Gamma(3-\alpha)}t^{2-\alpha}, \tag{9.219}$$

这是典型的莱维行走的结果. 这种等价性起源于小波数极限的有效性，这对应着为了计算方均位移而对莱维行走传播子的截断.

在方程 (9.218) 中引入分离变量 $W(x,t)=T(t)\phi(x)$，导致分数阶方程:

$$\frac{{\rm d}^2T_n}{{\rm d}t^2}=-\lambda_n\,{}_0D_t^{\alpha}T_n(t). \tag{9.220}$$

瞬间本征解 λ_n 代表了第 n 个本征值. 对方程 (9.220) 进行拉普拉斯变换，人们还要提供两个初始值，即选 $T(0)=1$ 和 $\mathrm{d}T/\mathrm{d}t|_{t=0}=0$，获得

$$T_n(u)=\frac{1/u}{1+\lambda_n u^{\alpha-2}}. \tag{9.221}$$

用 Mittag-Leffler 函数，这个结果能被变回到时间域：

$$T_n(t)=E_{2-\alpha}(-\lambda_n t^{2-\alpha}), \tag{9.222}$$

它的级数展开为

$$T_n(t)=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{(-\lambda_n t^{2-\alpha})^j}{\Gamma[1+(2-\alpha)j]}. \tag{9.223}$$

注意当 $2-\alpha>1$，该函数没有长时间渐进表达式.

9.8 莱维飞行：超越有限矩的随机运动

本节导出莱维飞行过程的分数阶克莱因–克拉默斯方程. 在连续时间无规行走框架中，该过程被一个泊松等待时间分布密度函数所确定

$$w(t)=\frac{1}{\tau}\exp(-t/\tau); \tag{9.224}$$

同时，跳跃步长的分布密度函数为莱维稳定型，即跳跃分布密度函数形式为

$$\psi(x,t)=L_\mu(x)\tau^{-1}\exp(-t/\tau)\sim\frac{B_\mu}{|x|^{1+\mu}}\tau^{-1}\exp(-t/\tau), \tag{9.225}$$

其中，$1<\mu<2$. 在傅里叶–拉普拉斯空间，其渐进极限呈现出

$$\psi(k,u)\sim 1-u\tau-\sigma^\mu|k|^\mu. \tag{9.226}$$

这个模型导致 FKKE

$$\frac{\partial W}{\partial t}+v\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{F(x)}{m}\frac{\partial W}{\partial v}=\eta\left(\frac{\partial}{\partial v}v+K^\mu_{-\infty}D^\mu_x\right)W(x,v,t), \tag{9.227}$$

其中，分数阶外尔算符定义为

$$_{-\infty}D^\mu_x W(x,v,t)=\frac{1}{\Gamma(\mu)}\int_{-\infty}^{x}\mathrm{d}x'\frac{W(x',v,t)}{(x-x')^{1-\mu}}. \tag{9.228}$$

在以上定义中，事实上还包括了一个相因子，所以它履行广义微分定理:

$$\begin{aligned}F\{_{-\infty}D^\mu_x W(x,v,t)\}&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\exp(\mathrm{i}kx)\,_{-\infty}D^\mu_x W(x,v,t)\\&=-|k|^\mu W(k,v,t).\end{aligned} \tag{9.229}$$

讨论

通过对速度 v 积分，我们从 FKKE(9.227) 获得分数阶电报型方程:

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{1}{\eta}\frac{\partial^2 W}{\partial t^2}=\left(-\frac{\partial}{\partial x}\frac{F(x)}{m\eta}+K_{-\infty}^{\mu}D_x^{\mu}\right)W(x,v,t). \tag{9.230}$$

在强摩擦极限下，忽略二阶时间导数，则重新回到分数阶福克尔–普朗克方程. 它已被在随机环境中的莱维飞行所推断. 这种类型的分数阶克莱因–克拉默斯方程以及其相关的分数阶福克尔–普朗克方程，从动力学上讲就是莱维噪声方法，导致发散的方均位移 $\langle x^2(t)\rangle=\infty$，这是莱维飞行的最具代表性的结果.

9.9 评 注

本章将 Chapman-Kolmogorov 方程推广到连续时间相空间动力学，说明了这个新方程对一大类随机模型有着共同的地位，可以描写外场中欠阻尼以及过阻尼下的正常和反常输运. 为了给出某个模型，三个关键的因素必须提供给广义 Chapman-Kolmogorov 方程.

(1) 等待时间分布密度函数 $w(t)$，确定了两次速度发生变化之间所要消耗的时间. 这个 $w(t)$ 描写了在一个给定态被捕获的时间，或者花在某个速度模上的时间. 前者导致莱维寄生，在自由场中显示欠扩散；后者导致莱维漫游，自由场中产生欠弹道运动. 在莱维飞行和布朗运动的马尔可夫情形下，等待时间分布密度函数被抛弃，用一个平均时间步长 Δt 来代替.

(2) 空间瞬间耦合 $p(\Delta x|t)$，表征了每个对应于等待时间 t 的运动事件所覆盖的距离为 Δx. 在布朗运动、莱维潜行和莱维飞行中，通过一个脱耦形式 $\delta(\Delta x-v\tau^*)$ 来对它们模型，其中 τ^* 被当作一个小参数，代表由朗之万机制产生试验粒子运动的一个有效时间尺度.

(3) 速度增量的前两次矩 $\langle\Delta v\rangle$ 和 $\langle(\Delta v)^2\rangle$. 为了完成向分数阶克莱因–克拉默斯方程的过渡，这两个量是需要提供的. 这些矩通过摩擦、外力和熵确定了试验粒子与它的环境的相互作用. 已经假设这两个矩的计算是基于 δ 关联的高斯噪声驱动的朗之万方程.

远离经典布朗运动情形，莱维潜行可能是反常模型最有根据的情况. 它的基本要素是捕获机制，已经被公认为非晶半导体中离散电荷载体输运，液体中过量电荷运动，混沌哈密顿系统的相空间动力学等.

莱维飞行仅对很有限的问题具有物理上的直觉性. 否则，重质量粒子需要有一个有限的速度. 这在莱维飞行模型中显得尤为重要，非常长的跳跃被允许瞬间完成. 所以说，试验粒子在实空间的莱维飞行至多是一种近似. 此外，在线性摩擦假设下莱维噪声驱动的朗之万方程是否有效呢？

在这些问题范围之外的两种方式分别为：其一是著名的莱维行走，它能被推广到存在外场和相空间；其二为莱维漫游 (rambling)，由莱维行走的小波数极限导出. 两者均产生有限的任何阶矩，包括运动跳跃和抑制，导致振荡叠加到弛豫的行为.

布朗过程、莱维潜行、莱维漫游的特征均是通过朝着吉布斯–玻尔兹曼平衡分布演化. 广义爱因斯坦关系以及第二爱因斯坦关系的适用性与这种接近经典热平衡的动力学行为有关.

由一个特征 (平均) 时间发散的自相似等待时间分布密度函数所产生的所有过程，按照分数阶里斯方程，其普遍行为是 Mittag-Leffler 速度平衡. 在这个意义上，稳定解符合麦克斯韦分布. 最后需要说明的是，如果转移核选择的合适，就能再现空间或时间上的非传统导数，继而给出分数阶福克尔–普朗克方程.

第10章　莱 维 飞 行

本章导读：莱维飞行是一种存在大跳跃事件的马尔可夫过程，其中跳跃长度具有长拖尾分布. 用它作为一个噪声驱动力自由粒子随机运动，求解分数阶福克尔–普朗克方程或朗之万方程，其分布也是幂律形式. 需把行走者装入一个边长随时间膨胀的盒子内来计算粒子的方均位移，显示超扩散，否则粒子二次矩发散，即使简谐势也不能捕获莱维行走；而需要用一个四次以上的强束缚势来完成该任务. 给出柯西振子和非谐莱维振子的精确解，特别是分布密度函数在单稳势中出现双峰结构和分叉现象.

众所周知，布朗运动描写了小宏观颗粒在液体中的运动，或者气体分子承受周围原子的不平衡撞击，利用这种运动可以揭示媒介的原子结构. 布朗运动的经典问题作为一个范例，其普适性在以前一直没有受到挑战. 原则上已有两大类方法去研究布朗运动：一是朗之万方法，其基于平均场思想而将周围分子形成的热库的影响模拟成一个与时间有关的随机力；二是筑建在玻尔兹曼型输运方程的动理学方法，其中碰撞考虑的是实验粒子和一个给定近邻粒子的截面. 在前一种方法中，随机力通常被假设是白高斯噪声，① 涨落的关联时间远小于宏观运动的时间尺度 (即速度和位置的关联时间)；② 与热库的相互作用是弱的, 在这个意义上每次碰撞导致布朗粒子速度和位置的一个各自变化. 数学上，后者与中心极限定理相联系，也就是，独立同分布随机变量的和具有有限方差，且收敛于高斯分布.

10.1　莱维飞行的特性

莱维飞行是随机的马尔可夫过程，由于存在相当大的跳跃事件，因而它不同于规则的布朗运动. 其中跳跃长度是按照含有一个长拖尾 ($|x|^{-1-\alpha}$) 的莱维稳定律分布的，这里 α 称为莱维指数，取值范围在 $0<\alpha<2$. 以致于大于 α 阶矩发散, 例如，自由粒子的二次矩发散. 这个特性强烈违背了具有任意阶有限矩的扩散过程的经典高斯分布. 从物理观点来讲，莱维飞行是实验粒子与周围环境分子强碰撞的结果.

虽然莱维飞行具有马尔可夫性质，但发散的方差可能使它们丧失作为模型化的一个具有有限质量的扩散粒子的资格. 不过，莱维飞行有许多重要的应用，其中并不需要有限的速度，例如，在单分子光谱学中的能量扩散，一个给人深刻印象的

莱维过程的实验证实是研究一个单离子在一维光子晶体的位置研究中发现的，那里观测到离子动能是发散的. 另外，从唯象的观点看，莱维飞行已经用来描写等离子体和分子碰撞的动力学. 它们也被成功地应用于描写细菌图案统计，信天翁鸟等. 不过，最早的莱维飞行的应用是在金融股票，当然它在周期势中也显示出令人惊讶的丰富的带结构. 所以，莱维飞行是一个超越布朗运动的很好的研究典例，尽管它曾被称为“数学之妖”.

考虑一个粒子的运动方程：

$$\dot{x}(t)=\frac{F(x)}{\gamma m}+\eta(t), \tag{10.1}$$

其中，m 是粒子的质量，γ 代表摩擦系数，$F(x)$ 是外部力场，噪声 $\eta(t)$ 是反常行为的源泉. 假设不同时刻的 η 是无关联的，可称为 “白莱维噪声”，其满足莱维统计. 在傅里叶空间，定义噪声变量的特性函数

$$p(k)=\int \mathrm{d}\eta \exp(-\mathrm{i}k\eta)p(\eta)=\exp(-D|k|^{\mu}), \tag{10.2}$$

这里，$0<\mu<2$. $p(\eta)$ 的概率密度函数具有一个渐进幂律行为，即 $p(\eta)\sim|\eta|^{-1-\mu}$. 图 10.1 给出了一个白莱维噪声序列. 用波数 k 的显式依赖来代表一个函数的傅里叶变换，用 u 代表时间有关函数的拉普拉斯变换. 对于 $\mu=2$ 的特殊情况，$\eta(t)$ 就是一个高斯白噪声，也就回到布朗运动情况，分数阶福克尔–普朗克方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{F(x)W(x,t)}{\gamma m}\right]+D\nabla^{\mu}W(x,t), \tag{10.3}$$

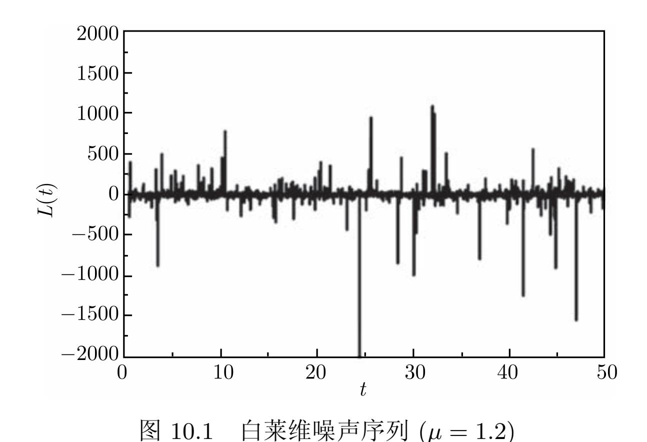


图 10.1　白莱维噪声序列 ($\mu=1.2$)

其中，D 代表广义扩散系数，其量纲为 $[D]=\mathrm{cm}^{\mu}\cdot\mathrm{s}^{-1}$. 里斯分数阶导数 ∇^{μ} 通过它的傅里叶变换来定义

$$\nabla^{\mu}=-\int\frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\exp(\mathrm{i}kx)|k|^{\mu} \tag{10.4}$$

注意在 FFPE(10.3) 中，作用在力项上的一阶微分算符不受引入莱维统计 (10.2) 式的影响.

下面，考虑三种情况：① 自由飞行 $F=0$；② 常量力 $F(x)=F_0$；③ 简谐力 $F(x)=-\lambda x$，并与布朗运动相比较.

10.2　自由莱维飞行

在力自由情况下，需要求解反常扩散方程

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t)=D\nabla^{\mu}W(x,t). \tag{10.5}$$

对上述方程进行傅里叶变换，并利用分数阶里斯算符的定义，即方程 (10.4)，有

$$\frac{\partial}{\partial t}W(k,t)=-D|k|^{\mu}W(k,t), \tag{10.6}$$

解为

$$W(k,t)=\exp(-Dt|k|^{\mu}), \tag{10.7}$$

同时，这还需要尖锐的初始分布 $x(0)=0$，对应于 $W(x,0)=\delta(x)$ 或者 $W(k,0)=1$. 方程 (10.2) 已给出了莱维统计的特性函数，在实空间，发现稳定律 L_{μ}:

$$\begin{aligned}W(x,t)&=(Dt)^{-1/\mu}L_{\mu}\left[\frac{|x|}{(Dt)^{1/\mu}}\right]\\&=\frac{\pi}{\mu|x|}H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{|x|}{(Dt)^{1/\mu}}\left|\begin{matrix}(1,1/\mu),(1,1/2)\\(1,1),(1,1/2)\end{matrix}\right.\right].\end{aligned} \tag{10.8}$$

在方程 (10.8)，已经精确地用 Fox 的 H 函数来表示莱维分布. 图 10.2 给出了 4 种 μ 指数下的莱维分布. $W(x,t)$ 的渐进行为由方程 (10.8) 给出，

$$W(x,t)\sim\frac{Dt}{|x|^{1+\mu}}. \tag{10.9}$$

若 $|x|^{\mu}/(Dt)\gg 1$，人们遇到一个问题：方均位移在所有时刻发散，即 $\langle x^2(t)\rangle=\infty$. 在直观上是清楚的，这是由于在莱维飞行中存在任意长的跳跃，可参见图 10.1.

数学上，从方程 (10.7) 出发，用特性函数来表示位移的 n 次矩:

$$\langle x^n(t)\rangle=\mathrm{i}^n\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}k^n}W(k,t)\,|_{k=0}\ ,$$

由此可知当 $n=2$，结果发散是显然的.

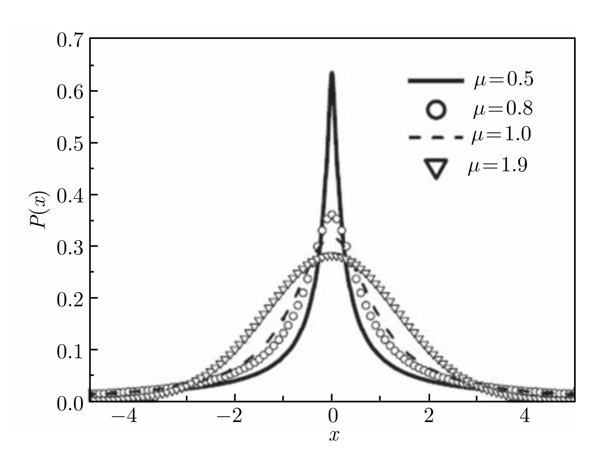


图 10.2　4 种 μ 指数下的莱维分布

为了提取方程 (10.8) 所暗示的标度形式，把行走者装入一个假想的增长的盒子里：

$$\langle x^2(t)\rangle_L \sim \int_{L_1 t^{1/\mu}}^{L_2 t^{1/\mu}} \mathrm{d}x x^2 W(x,t) \sim t^{2/\mu}. \tag{10.10}$$

这个标度结果，也就是将分布密度函数的渐进表示式 (10.9) 代入随时扩大的积分上下限. 二次矩的定义为 (10.10) 式，从而也就不再被方均位移 $\langle x^2(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x x^2 W(x, t) = \infty$ 的发散所烦恼.

当 $\mu > 1$，位移绝对值的平方

$$\langle |x(t)|\rangle^2 = \left[\int \mathrm{d}x |x| W(x,t)\right]^2 \tag{10.11}$$

收敛，并且正比于 $\langle x^2(t)\rangle_L$ 这里 $-L_1 = L_2 = L$.

自由莱维飞行的性质，也可以使用特性函数方法，直接从方程 (10.1) 获取. 这种观点允许人们提取速度分布，其也产生出莱维分布. 同样可获得平均动能，即对于一个质量是 m 的行走者，在 $0 < \mu < 2$ 情况下，有

$$\left\langle \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle = \infty. \tag{10.12}$$

10.3　常量力下的漂移和加速度

对于一个常量力 $F(x) = F_0$，FFPE(10.3) 写作

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{F_0 W(x,t)}{\gamma m}\right] + D\nabla^{\mu} W(x,t), \tag{10.13}$$

实施傅里叶变换，将方程变为

$$\frac{\partial}{\partial t}W(k,t)=\left[-\mathrm{i}k\frac{F_0}{\gamma m}-D|k|^{\mu}\right]W(k,t), \tag{10.14}$$

初始条件是 $W(k,0)=1$，传播子 $W(k,t)$ 的解为

$$W(k,t)=\exp\left[-t\left(\mathrm{i}k\frac{F_0}{\gamma m}+D|k|^{\mu}\right)\right]. \tag{10.15}$$

这与自由莱维飞行具有相同的分布，只不过作了一个坐标平移

$$W(x,t)=W_0\left(x-\frac{F_0 t}{\gamma m},t\right), \tag{10.16}$$

式中，W_0 为自由莱维飞行的分布密度函数. 坐标的移动是因为在伽利略变换系中，摩擦力反抗施加常量力之间的平衡，即 $\gamma mv=F_0$. 显然，在坐标空间，解的形式仍然由 (10.8) 式给出，但需作坐标平移, 结果见图 10.3.

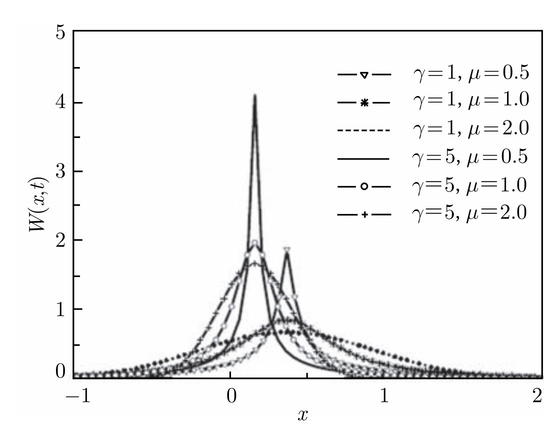


图 10.3　常量力场 $F(x)=F_0$ 下，$t=1.0$ 时刻莱维飞行粒子的坐标分布密度函数

如果一次矩存在，即对于 $1<\mu\leqslant 2$，那么从方程 (10.16) 可以发现

$$\langle x(t)\rangle=\frac{F_0 t}{\gamma m}. \tag{10.17}$$

对于标准的 FPE 以及欠扩散 FFPE，粒子沿着常量力的平均位移与自由场下的方均位移之间存在着广义爱因斯坦关系：

$$\langle x(t)\rangle_{F_0}=\frac{F_0}{2k_{\mathrm{B}}T}\langle x^2(t)\rangle_0. \tag{10.18}$$

然而对于莱维飞行，由于自由粒子的方均位移发散，所以广义爱因斯坦关系不成立，从而涨落耗散定理被违背.

10.4　线性力和非吉布斯稳态解

在标准的布朗运动模型中，一个扩散粒子能通过一个简谐势而被俘获，以致达到一个具有有限方差的平衡分布. 精确地说，这个平衡分布就是吉布斯–玻尔兹曼分布. 该特性在一个简谐势中的欠扩散运动也被满足. 对于莱维飞行而言，稳定分布还是存在的，但无有限方差，所以莱维飞行不能描述接近平衡的系统.

在线性力 $F(x)=-\lambda x$ 的情况下，对应的简谐势为 $V(x)=\dfrac{1}{2}\lambda x^2$，FFPE(10.3) 成为

$$\frac{\partial}{\partial t}W(x,t)=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\lambda}{\gamma m}xW(x,t)\right]+D\nabla^{\mu}W(x,t), \tag{10.19}$$

在傅里叶空间，共轭方程写作

$$\frac{\partial}{\partial t}W(k,t)=-\frac{\lambda}{\gamma m}k\frac{\partial}{\partial k}W(k,t)-D|k|^{\mu}W(k,t), \tag{10.20}$$

作一个变量变换，很容易求解这个方程，

$$W(k,t)=W(k,0)\exp\left\{-\frac{\gamma mD|k|^{\mu}}{\mu\lambda}\left[1-\exp\left(-\frac{\mu\lambda}{\gamma m}t\right)\right]\right\}, \tag{10.21}$$

这依然是一个傅里叶空间的莱维分布. 不过与自由场情况相比，需用一个不同的宽度 $[\gamma mD/(\mu\lambda)][1-\exp(-\mu\lambda t/\gamma m)]$ 来替代方程 (10.7) 中的 Dt，并且实空间的精确解通过插入与时间有关的宽度，可从 (10.8) 式获得. 当然，$\mu=2$ 回到布朗运动的结果. 但在一般情况下 $(\mu\neq 2)$，会出现不同的结果. 给出 $t\to\infty$ 稳定分布：

$$W_{\rm st}(k)=\exp\left(-\frac{\gamma mD}{\mu\gamma}|k|^{\mu}\right). \tag{10.22}$$

在 x 空间，精确解能用 Fox H 函数来表示：

$$W_{\rm st}(x)=\frac{\pi}{|x|}H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{|x|^{\mu}\mu\lambda}{D\gamma m}\,\middle|\,{}^{(1,1),(1,\mu/2)}_{(1,\mu),(1,\mu/2)}\right], \tag{10.23}$$

导致渐进幂律行为

$$W_{\rm st}(x)\sim\frac{D\gamma m}{\mu\lambda|x|^{1+\mu}}. \tag{10.24}$$

那么

$$\langle x^2\rangle_{\rm st}=\int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}x x^2W_{\rm st}(x)=2D\gamma m/(\mu\lambda)\int_0^{\infty}{\rm d}x x^{1-\mu}=\infty\quad(1<\mu\leqslant 2).$$

则在简谐势中，粒子的坐标二次矩仍然是发散的，它的坐标和速度分布见图 10.4.

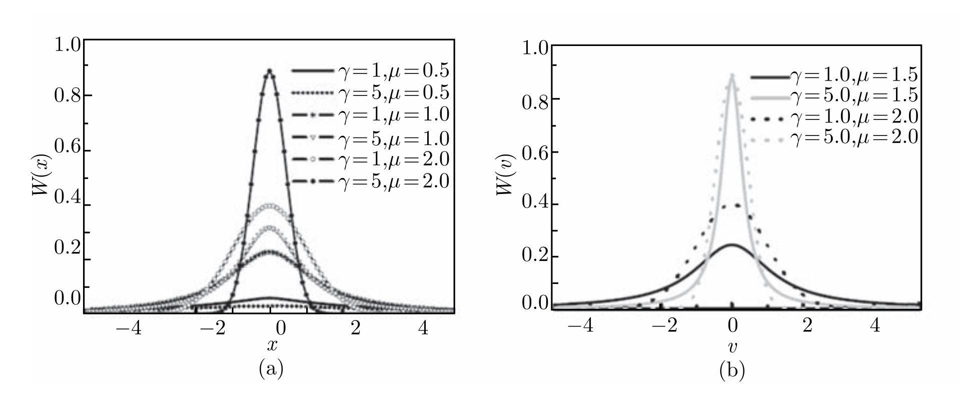


图 10.4　莱维飞行粒子在简谐势中的稳态坐标 (a) 和速度 (b) 分布

10.4.1　朗之万方程的解

所有上述结果能直接从朗之万方程等价地得到. 为此，考虑一个常量力附加到一个线性力场之上：$F(x) = -\lambda x + F_0$. 方程 (10.1) 的解是

$$x(t) = \exp\left(-\frac{\lambda}{\gamma m}t\right)\int_0^t \mathrm{d}t' \exp\left(\frac{\lambda}{\gamma m}t'\right)\left[\eta(t') + \frac{F_0}{\gamma m}\right]. \tag{10.25}$$

基于如下的等式，可以给出分布密度函数

$$\begin{aligned}p(x,t) &= \langle\delta[x - x(t)]\rangle \\ &= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\langle\exp\{\mathrm{i}k[x - x(t)]\}\rangle \\ &= \int \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\exp(\mathrm{i}kx)p(x,t).\end{aligned} \tag{10.26}$$

将方程 (10.25) 代入特性函数中，有

$$\begin{aligned}p(k,t) &= \langle\exp[-\mathrm{i}kx(t)]\rangle \\ &= \left\langle\exp\left\{-\mathrm{i}k\int_0^t \mathrm{d}t' \exp\left[-\frac{\lambda}{\gamma m}(t-t')\right]\left[\eta(t') + \frac{F_0}{\gamma m}\right]\right\}\right\rangle,\end{aligned} \tag{10.27}$$

将以上的积分用离散和来计算，则

$$\begin{aligned}p(k,t) = &\exp\left\{-\mathrm{i}k\frac{F_0}{\lambda}\left[1 - \exp\left(-\frac{\lambda t}{\gamma m}\right)\right]\right\} \\ &\times\left\langle\prod_{t'=0}^{t}\exp[-\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\lambda(t-t')/(\gamma m)}\Delta k\eta(t')]\right\rangle\end{aligned} \tag{10.28}$$

或

$$p(k,t)=\exp\left\{-\mathrm{i}k\frac{F_0}{\lambda}\left[1-\exp\left(-\frac{\lambda t}{\gamma m}\right)\right]\right\}\times\prod_{t'=0}^{t}\langle\exp[-\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\lambda(t-t')/(\gamma m)}\Delta k\eta(t')]\rangle. \tag{10.29}$$

用莱维噪声变量的特性函数，得到

$$p(k,t)=\exp\left\{-\mathrm{i}k\frac{F_0}{\lambda}\left[1-\exp\left(-\frac{\lambda t}{\gamma m}\right)\right]\right\}\times\prod_{t'=0}^{t}\exp[-D\mathrm{e}^{-\mu\lambda(t-t')/(\gamma m)}\Delta^{\mu}|k|^{\mu}). \tag{10.30}$$

重新引入积分，并在从方程 (10.1) 过渡到方程 (10.3) 时，用重整化变换：$D\Delta^{\mu-1}\to D$，我们最终有

$$p(k,t)=\exp\left\{-\mathrm{i}k\frac{F_0}{\lambda}\left[1-\exp\left(-\frac{\lambda t}{\gamma m}\right)\right]\right\}\times\exp\left\{-D\gamma m\left[1-\exp\left(-\frac{\mu\lambda t}{\gamma m}\right)\right]\frac{|k|^{\mu}}{\mu\lambda}\right\}. \tag{10.31}$$

讨论

(1) 对于 $\lambda=0$，恢复常量力结果，即方程 (10.15)；对于 $F_0=0$，得到与方程 (10.21) 一致的结果. 按照方程 (10.8) 的自由莱维飞行结果 $W_0(x,t)$，同样可以在方程 (10.32) 中令 $\lambda=F_0=0$ 而获得. 事实上，对比方程 (10.8)，有

$$W_{\lambda,F_0}=W_0\left\{x-\frac{F_0}{\lambda}[1-\exp(-\lambda t/\gamma m)],\frac{\gamma m}{\mu\lambda}[1-\exp(-\lambda t/\gamma m)]\right\}. \tag{10.32}$$

(2) 当存在简谐势时，我们不能简单地做一个伽利略变换而取消除常量力，这是因为同时存在的非线性力，也就挑选出了一个特殊的参考框架.

10.4.2　分离变量方法

用分离变量方法也能导出方程 (10.21) 的解，即假设解具有分离变量的级数和形式：$W_n(x,t)=T_n(t)\phi_n(x)$，从而 $W(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}W_n(x,t)$. 将 $W(x,t)$ 代入方程 (10.3)，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}T_n(t)=-\lambda_nT_n(t),$$
$$\lambda_n\phi_n(x)+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\frac{\lambda}{\gamma m}x\phi_n(x)\right]+D\nabla^{\mu}\phi_n(x)=0, \tag{10.33}$$

其中，λ_n 是本征值. 对于时间行为，我们发现常见的指数衰减模：$T_n(t)=\exp(-\lambda_nt)$，而对于空间本征函数，有

$$\phi_n(x) = c_n|k|^{\lambda_n \gamma m/\lambda} \exp\left(-\frac{|k|^\mu}{\mu}\right), \tag{10.34}$$

本征值是 $\lambda_n = (\lambda/\gamma m)\mu n$，那么，在波数空间完全解为

$$W(k,t) = \exp\left(-\frac{D\gamma m}{\mu\lambda}|k|^\mu\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{D\gamma m}{\mu\lambda}\right)^n |k|^{\mu n} \exp\left(-\frac{\mu n \lambda t}{\gamma m}\right), \tag{10.35}$$

这个求和收敛于方程 (10.21). 基于 Fox H 函数，变换到实空间，有

$$\begin{aligned} W(x,t) = & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{D\gamma m}{\mu\lambda}\right)^n \frac{\pi}{|x|} \mu^{\lambda n/(\gamma m)} \mathrm{e}^{-\mu n \lambda t/(\gamma m)} \\ & \times H_{2,2}^{1,1}\left[\frac{\mu\lambda}{D\gamma m}|x|^\mu \left|\begin{matrix}(1-\lambda n/\gamma m,1),(1,\mu/2) \\ (1,\mu),(1,\mu/2)\end{matrix}\right.\right]. \end{aligned} \tag{10.36}$$

10.4.3 有效时间

通过比较粒子在简谐势的分布 $W(x,t)$ 与自由飞行的分布 $W_0(x,t)$，获得一个关系式:

$$W(x,t) = W_0(x,t_{\text{eff}}), \tag{10.37}$$

其中，有效时间 t_{eff} 定义为

$$t_{\text{eff}} = \frac{m\gamma}{\mu\lambda}\left[1 - \exp\left(-\frac{\mu\lambda}{\gamma m}t\right)\right]. \tag{10.38}$$

10.5 非线性振子势中的莱维飞行

在一个有界的外部势场中的莱维飞行，其长时间行为将带来更多的莱维行走的结论. 在连续极限下，莱维飞行被具有长拖尾和渐进幂律跳跃长度分布的连续时间无规行走，或者一个含有 δ 关联的莱维噪声来描写. 这两个描写均能映射到空间分数阶扩散方程:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D\frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha} f(x,t), \tag{10.39}$$

其中，分数阶里斯算符 $\partial^\alpha/\partial|x|^\alpha$ 用它的傅里叶变换来定义:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^\alpha}{\partial|x|^\alpha} f(x,t)\mathrm{d}x \equiv -|k|^\alpha f(k,t), \tag{10.40}$$

这里，$0 < \alpha \leqslant 2$. 下面局限于分析 $1 \leqslant \alpha \leqslant 2$. 当 $\alpha = 2$，方程 (10.39) 退化为经典扩散方程，描写了高斯输运. 从方程 (10.39) 的傅里叶变换, $\partial f/\partial t = -|k|^\alpha f(k,t)$，得到特性函数:

$$f(k,t) = \exp(-Dt|k|^\alpha). \tag{10.41}$$

其实这也是一个指数为 α 的对称莱维稳定律分布的特性函数. 在位置空间，(10.41) 式能用 Fox H 函数精确地表达出来. 对于大 $|x|$，有 $f(x,t) \sim \mathrm{D}t/|x|^{1+\alpha}$，以致于方差发散，$\langle x^2(t)\rangle = \infty$. 基于分数阶 Klein-Kramers 方程，在相空间的莱维飞行也存在这样的结论.

然而，人们很少知道莱维飞行在外场中的行为，也就是存在一个势 $U(x)$ 情况下，分布密度函数 $f(x,t)$ 的性质. 事实上，仅有个别的例子能精确求解，例如，简谐势中的莱维飞行. 那些解仍具有与自由场相同的稳态律，这就像 Ornstein-Uhlenkeck 过程 $[\dot{x} = -\gamma x + \xi(t)]$，其分布密度函数是高斯的. 一般而言，存在外势和过阻尼环境下的莱维飞行由如下的空间分数阶 Fokker-Planck 或 Einstein-Smoluchowski (ES) 方程所产生:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{U'(x)}{m\eta} + D\frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha}\right) f(x,t). \tag{10.42}$$

这一方程的特征是：飘移项进入通常的一阶导数中，那么也就保持着它加性量的性质，例如，一个常量力 $F(x) = V\eta m$，其解只需在自由飘移的分布密度函数中用变量 $x - Vt$ 来代替坐标. 但是对一般外势而言，其稳定解不同于玻尔兹曼分布.

本节考虑莱维噪声驱动下的三种过阻尼非线性振子的稳定分布. 这三种莱维振子由如下的势 $U(x)$ 来特征：

类型 1: $U(x) = bx^4/4$ (四次莱维振子)；

类型 2: $U(x) = ax^2/2 + bx^4/4$ (非谐莱维振子)；

类型 3: $U(x) = bx^{2m+2}/(2m+2)$，$m = 1, 2, \cdots$ (强非线性莱维振子).

作为莱维飞行的一个非期待行为，例如，存在双峰解 (即分布密度函数有两个极大) 和有限的二次矩，能够在如下的超简谐势中发现.

$$U(x) = \frac{ax^{2m+2}}{2m+2}, \quad m = 1, 2, \cdots \tag{10.43}$$

注意这里 $a > 0$，并且它的量纲为 $[a] = \mathrm{g}\cdot\mathrm{cm}^{-2m}/\mathrm{s}^2$.

下面，用一个白莱维噪声驱动的朗之万方程以及空间分数阶福克尔–普朗克方程来描写外场中的莱维飞行. 显示在超简谐势中粒子方均位移方差有限，并且分布密度函数存在多重形态.

10.5.1　实空间方程

1. 含莱维噪声的朗之万方程

莱维噪声的过阻尼朗之万方程为

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{F(x)}{M\gamma} + Y_\alpha(t), \tag{10.44}$$

这里，$F(x)=-U'(x)$，M 是粒子的质量，γ 是摩擦系数，$Y_\alpha(t)$ 为一个稳定的白莱维噪声，其中指标 $1\leqslant\alpha\leqslant 2$. 白莱维噪声的时间间隔 $[t,t+\Delta t]$ 内的积分

$$L(\Delta t)=\int_t^{t+\Delta t}Y_\alpha(\tau)\mathrm{d}\tau, \tag{10.45}$$

也是一个具有稳定独立增量的 α 稳定过程，它的特性函数为

$$\hat{p}_L(k,\Delta t)=\exp(-D|k|^\alpha\Delta t), \tag{10.46}$$

其中，常量 D 具有朗之万源强度的含义，量纲为 $[D]=\mathrm{cm}^\alpha/\mathrm{s}$.

2. 分数阶福克尔–普朗克方程

由于含白莱维噪声的朗之万方程还是一个马尔可夫过程，所以理所当然地存在对应的涨落平均的确定性描写，这就是空间分数阶福克尔–普朗克方程. 现推导在 δ 初始条件下

$$f(x,0)=\delta(x), \tag{10.47}$$

方程 (10.39) 的解.

出现在方程 (10.39) 中的空间分数阶导数 $\partial^\alpha/\partial|x|^\alpha$ 称为里斯分数阶导数[①]，通过以下式子来定义

$$\frac{\mathrm{d}^\alpha f}{\mathrm{d}|x|^\alpha}=\begin{cases}-\dfrac{D_+^\alpha f+D_-^\alpha f}{2\cos(\pi\alpha/2)}, & \alpha\neq 1,\\ -\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}Hf, & \alpha=1.\end{cases} \tag{10.48}$$

用如下的缩写代表向左和向右的黎曼–刘维尔导数 $(1\leqslant\alpha\leqslant 2)$:

$$(D_+^\alpha f)(x)=\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\int_{-\infty}^x\frac{f(\xi,t)\mathrm{d}\xi}{(x-\xi)^{\alpha-1}} \tag{10.49}$$

和

$$(D_-^\alpha f)(x)=\frac{1}{\Gamma(2-\alpha)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\int_x^{\infty}\frac{f(\xi,t)\mathrm{d}\xi}{(\xi-x)^{\alpha-1}}, \tag{10.50}$$

而 Gibert 变换算符为

$$(\mathbf{H}f)(x)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(\xi)\mathrm{d}\xi}{x-\xi}. \tag{10.51}$$

注意：这里关于 $\partial^\alpha/\partial|x|^\alpha$ 的定义意味着空间分数阶福克尔–普朗克方程的强烈非局域特性.

① 原始的 Riesz 分数阶导数的定义是通过它作用在函数 $f(x,t)$ 上的傅里叶变换来定义的：$F[\partial^\alpha f(x,t)/\partial|x|^\alpha]=-|k|^\alpha\hat{f}(k,t)$. 注意这仅是将一个分数阶空间导数写了一个形式表达, 当 $\alpha=2$, 它退化为标准的二阶偏导数 $\partial^2/\partial x^2$, 但是对于 $\alpha=1$，它并不对应于 $\partial/\partial x$.

3. 方程的重新标度

为了将动力学方程无量纲化，我们引入重新标度的变量：$x' = x/x_0$ 和 $t' = t/t_0$，这里 $x_0 = (MD\gamma/a)^{1/(c-2+\alpha)}$ 和 $t_0 = x_0^\alpha/D$. 忽略上撇符号，则关于无量纲坐标和时间的白莱维噪声驱动的朗之万方程，以及对应的分数阶福克尔–普朗克方程分别写为

$$\dot{x} = -U'(x) + Y_\alpha(t), \tag{10.52}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(U'(x)f\right) + \frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha}f(x,t), \tag{10.53}$$

其中，$U(x) = |x|^\alpha/c$.

10.5.2　傅里叶空间的方程

令 $\hat{f}(k,t)$ 代表特性函数，即 $f(x,t)$ 的傅里叶变换，记作

$$f(x,t) \div \hat{f}(k,t), \tag{10.54}$$

这里用符号 $\div$ 代表一个傅里叶变换对. 因为

$$(D_\pm^\alpha f)(x,t) \div (\mp \mathrm{i}k)^\alpha \hat{f}(k,t), \tag{10.55}$$

$$(\mathbf{H}f)(x,t) \div \mathrm{i}\,\mathrm{sgn}(k)\hat{f}(k,t), \tag{10.56}$$

所以，对于所有的 α，有

$$\frac{\partial^\alpha f}{\partial |x|^\alpha} \div -|k|^\alpha \hat{f}(k,t), \tag{10.57}$$

实空间的分数阶福克尔–普朗克方程在傅里叶空间的等价形式为

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} + |k|^\alpha \hat{f} = \cup_k \hat{f}, \tag{10.58}$$

初始条件为

$$\hat{f}(k, t=0) = 1, \tag{10.59}$$

归一化条件为

$$\hat{f}(k=0, t) = 1. \tag{10.60}$$

外势 $U(x)$ 变成 k 的线性微分算符

$$\begin{aligned}\cup_k \hat{f} &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\frac{\partial}{\partial x}\left(U'(x)f\right)\mathrm{d}x \\ &= -\mathrm{i}k\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{sgn}(x)|x|^{c-1}f(x,t)\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{10.61}$$

式中，$\mathrm{sgn}(x)$ 取与 x 相同的符号，例如，当 $x > 0$ 时，$\mathrm{sgn}(x) = 1$. 下面，使用逆公式

$$(\pm \mathrm{i}k)^{\alpha} f(x) \div (D_{\pm}^{\alpha} \hat{f})(k) \tag{10.62}$$

和

$$-\mathrm{isgn}(x) f(x) \div (\mathbf{H}\hat{f})(k), \tag{10.63}$$

获得外势算符的显式表达式

$$\cup_k \hat{f} = \begin{cases} \dfrac{k}{2\cos(\pi c/2)} \left(D_{+}^{c-1} - D_{-}^{c-1}\right) \hat{f}, & c \neq 3, 5, 7, \cdots; \\ (-1)^m k \dfrac{\mathrm{d}^{2m}}{\mathrm{d}k^{2m}} H\hat{f}, & c = 3, 5, 7, \cdots \end{cases} \tag{10.64}$$

若势多项式的指数为偶数 $c = 2m + 2$，$m = 0, 1, 2, \cdots$，则外势算符有一个简单的表示

$$\cup_k = (-1)^{m+1} k \frac{\partial^{2m+1}}{\partial k^{2m+1}}. \tag{10.65}$$

可以看到力项能在傅里叶空间用分数阶导数表示出来，但是在一般情况下 (c 不等于整数)，即使是计算分数阶福克尔–普朗克方程的稳定解也不是简单的. 此情形下，x 空间的非局域方程变换到 k 空间，也是非局域化的，这种非局域漂移是由扩散代入漂移项的.

10.6 解 析 结 果

先以四次柯西振子为例，给出分数阶福克尔–普朗克方程的稳态精确解，并且说明存在双形态；然后再继续向一般情况前进. 最主要的结果是有限矩，n–形态和分叉的参数依赖性.

10.6.1 布朗运动 ($\alpha = 2$)

如果朗之万方程中的噪声项 $Y_{\alpha}(t)$ 是高斯噪声，$\alpha = 2$，那么分数阶爱因斯坦–斯莫卢霍夫斯基为正常的. 它的稳定解为玻尔兹曼分布，

$$f_{\mathrm{st}}(x) = C \exp\left(-\frac{U(x)}{k_{\mathrm{B}}T}\right), \tag{10.66}$$

其中，T 是周围媒介的温度，k_{B} 是玻尔兹曼常量. 噪声强度 D 和摩擦系数 γ 之间的爱因斯坦关系为 $D = k_{\mathrm{B}}T/(m\gamma)$. 显而易见，稳定分布的形式完全仅由势能确定，例如，若势函数 $U(x)$ 存在一个极小，则对应的分布密度函数只有一个峰，而噪声的作用 (通过变化温度) 仅能改变分布密度函数的宽度. 但是，莱维噪声 ($\alpha < 2$) 的效应却引起分布密度函数的根本变化.

10.6.2　简谐莱维振子

简谐莱维振子的势函数取作

$$U(x)=\frac{ax^2}{2},\tag{10.67}$$

这里 $a=m\omega^2$，ω 是振子的频率，引入无量纲变量：$x'=x/x_0$ 和 $t'=t/t_0$，其中 $t_0=m\gamma/a=\gamma/\omega^2$，$x_0=(Dt_0)^{1/\alpha}$，忽略上撇符号，方程 (10.39) 的形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}(xf)+\frac{\partial^\alpha f}{\partial|x|^\alpha}.\tag{10.68}$$

我们感兴趣方程 (10.68) 的稳定解 $f_{\rm st}(x)$，它的特性函数定义为

$$f_{\rm st}(k)=\int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}x{\rm e}^{{\rm i}kx}f_{\rm st}(x).\tag{10.69}$$

方程的稳定形式 $(\partial f/\partial t=0)$ 的两边同时对 x 实施傅里叶变换，则关于特性函数的方程为

$$\frac{{\rm d}\hat f}{{\rm d}k}=-{\rm sgn}(k)|k|^{\alpha-1}\hat f(k),\tag{10.70}$$

方程 (10.70) 在条件 $\hat f(k=0)=1$(归一化结果) 的解是

$$\hat f(k)=\exp\left(-\frac{|k|^\alpha}{\alpha}\right).\tag{10.71}$$

这是莱维稳定分布密度函数的特性函数，而分布密度函数在大 x 的渐进形式由 (10.71) 式的级数展开的第一非解析项定出

$$f(|x|\to\infty)\approx-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{{\rm d}k}{2\pi}{\rm e}^{-{\rm i}kx}\frac{|k|^\alpha}{\alpha}=\frac{C}{|x|^{1+\alpha}},\tag{10.72}$$

其中，$C=\sin(\pi\alpha/2)\Gamma(\alpha)/\pi$. 在方程 (10.72) 及下面，广义积分运算的值需要用到阿贝尔求和来计算[①].

10.6.3　四次柯西振子

四次柯西振子的势函数选为

$$U(x)=\frac{1}{4}bx^4,\tag{10.73}$$

并且引入无量纲变量：$x'=x/x_0$ 和 $t'=t/t_0$，其中 $x_0=(m\gamma D/b)^{1/(2+\alpha)}$，$t=x_0^\alpha/D$，则分数阶 ES 方程重写为

---

① 阿贝尔求和：

$$\int_0^\infty {\rm d}tt^{\alpha+2m}{\rm e}^{-{\rm i}t}=(-1)^{m+1}{\rm i}{\rm e}^{-{\rm i}(\alpha\pi/2)}\Gamma(\alpha+2m+1),\quad m=0,1,2,\cdots$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(x^3 f) + \frac{\partial^\alpha f}{\partial |x|^\alpha}. \tag{10.74}$$

为了研究稳定解的性质，将方程变换成关于稳定分布密度函数的特性函数在傅里叶空间的方程.

首先考虑在四次势中的柯西–莱维飞行 ($\alpha = 1$) 的稳态分布密度函数，即如下方程的解

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(x^3 f_{\mathrm{st}}(x)\right) + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}|x|} f_{\mathrm{st}}(x) = 0, \tag{10.75}$$

现将以上方程变换到关于稳定分布密度函数的特性函数的方程，即在傅里叶空间，有

$$\frac{\mathrm{d}^3 \hat{f}_{\mathrm{st}}(k)}{\mathrm{d}k^3} = \mathrm{sgn}(k)|k|\hat{f}_{\mathrm{st}}(k). \tag{10.76}$$

在推导方程 (10.76) 时，用到了自然条件，即 $k \to \pm\infty$，特性函数和它的导数趋于零；特性函数[1] 同时还满足以下条件：

(1) $\hat{f}(0) = \hat{f}(0,t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t)\mathrm{d}x = 1$ (归一化)；

(2) $\hat{f}(k) = \hat{f}^*(k) = \hat{f}(-k)$，这里“$*$”代表复数共轭；

(3) 如果分布密度函数的整数次矩存在，它们与特性函数的同阶导数在 $k = 0$ 的值相联系，即

$$\begin{aligned} \langle x^p \rangle &= \frac{1}{\mathrm{i}^p} \frac{\mathrm{d}^p \hat{f}(0)}{\mathrm{d}k^p}, \quad p = 0, 2, 4, \cdots \\ \langle x^p \rangle &= 0, \quad p = 1, 3, 5, \cdots . \end{aligned} \tag{10.77}$$

讨论

第一个等式是关于对称分布密度函数的特性函数本身的欣钦 (Khinchin) 定理的结果；第二个等式是关于特性函数正定性的 Bochner-Khinchin 定理. 最后一个式子是因为分布密度函数是一个对称函数，所以所有奇次矩等于零.

在柯西振子 ($\alpha = 1$) 的特殊情况下，方程 (10.76) 的解是

$$\hat{f}_{\mathrm{st}}(k) = \frac{2}{\sqrt{3}} \exp\left(-\frac{|k|}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}|k|}{2} - \frac{\pi}{6}\right), \tag{10.78}$$

通过逆傅里叶变换，柯西振子的稳定分布密度函数为

$$f_{\mathrm{st}}(x) = \frac{1}{\pi(1 - x^2 + x^4)}. \tag{10.79}$$

注意以上 $f_{\mathrm{st}}(x)$ 有两个重要性质：

[1] $f(x,t)$ 的特性函数 $\hat{f}(k,t)$ 定义为：$\hat{f}(k,t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$.

(1) 在 $x \to \pm\infty$，$f_{\mathrm{st}}(x)$ 具有一个幂律渐进尾巴，即 $f_{\mathrm{st}}(x) \propto x^{-4}$，所以方差有限，坐标二次矩为

$$\langle x \rangle_{\mathrm{st}} = 1 \tag{10.80}$$

是有限的，故四次型势可以捕获莱维飞行;

(2) $f_{\mathrm{st}}(x)$ 在 $x_{\min} = 0$ 有一个局域极小，在 $x_{\max} = \pm 1/\sqrt{2}$ 有两个局域极大，意味着 PDF 的双峰态结构，这偏离了势仅在坐标原点 (即初始条件位移) 有一个极小的事实.

以上两个特点与布朗四次振子和线性莱维振子的稳定解明显地不同. 下面将看到对于所有 $1 \leqslant \alpha < 2$ 区间的 α 值，PDF 陡的幂律渐进和双峰分布是固有的.

特性函数的小波幅级数展开

对方程 (10.75) 进行变量替换

$$\eta(\xi) = k^{(\alpha-1)/3} \hat{f}(k), \quad \xi = k^{(\alpha+2)/3}, \tag{10.81}$$

则函数 $\eta(\xi)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^3\eta}{\mathrm{d}\xi^3} + \frac{A}{\xi^2}\left(\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}\xi} - \frac{\eta}{\xi}\right) = \lambda\eta, \tag{10.82}$$

其中，$A = (\alpha-1)(\alpha+5)(\alpha+2)^{-2}$，$\lambda = [3/(\alpha+2)]^3$.

在小 k 情况下，构造一个关于 ξ 正幂级数的解

$$\eta_\mu = \xi^\mu \sum_{j=0}^{\infty} a_j^{(\mu)} \xi^{3j}, \tag{10.83}$$

指数 μ 的确定方式如下. 用算符 $\hat{L}$ 代表方程 (10.82) 左边的运算，可以发现

$$\hat{L}\xi^m = \xi^{m-3}[m(m-1)(m-2) + A(m-1)]. \tag{10.84}$$

令上式方括号内的项等于零，得到出现在方程 (10.83) 的 μ 值的三个根

$$\mu_0 = 1, \quad \mu_+ = \frac{\alpha+5}{\alpha+2}, \quad \mu_- = \frac{\alpha-1}{\alpha+2}. \tag{10.85}$$

这三个根确定了方程 (10.82) 的三个特解. 将方程 (10.83) 代入方程 (10.82)，得到 $a_j^{(\mu)}$ 的循环关系：

$$a_{j+1}^{(\mu)}(\mu+3j+2)[(\mu+3j+3)(\mu+3j+1) + A] = \lambda a_j^{(\mu)}. \tag{10.86}$$

三个级数包含了任意常数 $a_0^{(\mu)}$，要由边界条件确定. 利用方程 (10.83)、(10.85) 和 (10.81)，则有

$$\hat{f}_\mu(\xi) = \eta_\mu(\xi)\xi^{-\mu_-} = \xi^{\mu-\mu_-} \sum_{j=0}^{\infty} a_j^{(\mu)} \xi^{3j}, \tag{10.87}$$

其中，μ 分别等于 μ_0、μ_+ 和 μ_-. 这就是特性函数三个特解的公式. 从归一化条件 $\hat{f}(\xi=0)=1$ 知：$a_0^{\mu_-}=1$，那么也就仅需确定 $a^{(\mu_0)}$ 和 $a^{(\mu_+)}$. 因为 $\mu_0-\mu_--1<0$，根据条件 $\hat{f}'(\xi=0)=0$，有 $a_0^{(\mu_0)}=0$. 所以，仅有一个常数 $a_0^{(\mu_+)}$ 保留未知. 一般解为

$$\hat{f}(\xi)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j^{(\mu_-)}\xi^{3j}+\xi^{6/(\alpha+2)}\sum_{j=0}^{\infty}a_j^{(\mu_+)}\xi^{3j}, \tag{10.88}$$

这里，$a_j^{(\mu_\pm)}$ 由方程 (10.86) 确定且 $a_0^{(\mu_-)}=1$. 用原来的波矢 k 替代 ξ，轻微地变化记号，有

$$\hat{f}(k)=\Sigma_1+ak^2\Sigma_2, \tag{10.89}$$

式中，

$$\begin{aligned}\Sigma_1&=\sum_{j=0}^{\infty}a_j^{(\mu_-)}k^{j(\alpha+2)},\\ \Sigma_2&=\sum_{j=0}^{\infty}a_j^{(\mu_+)}k^{j(\alpha+2)},\end{aligned} \tag{10.90}$$

其中，$a_j^{(\mu_\pm)}$ 由方程 (10.86) 确定，而 $a_0^{(\mu_+)}=a_0^{(\mu_-)}=1$，这里 $\mu_\pm$ 已由方程 (10.85) 给出. 为了定出 a，利用在无穷远的边界条件 $\hat{f}(k=\infty)=0$，得到

$$a=-\lim_{k\to\infty}\frac{\Sigma_1}{k^2\Sigma_2}. \tag{10.91}$$

现在，考虑两个已经在柯西振子中讨论过的重要性质：幂律尾巴和双峰结构. 首先考虑 $x\to\pm\infty$ 分布密度函数的幂律拖尾，这个渐进行为由方程 (10.89) 的第一个非解析项确定，其为 $a_1^{(\mu_-)}|k|^{\alpha+2}$. 对这一项作逆傅里叶变换，有

$$f(x)\approx\frac{\sin(\pi\alpha/2)\Gamma(\alpha)}{\pi|x|^{\alpha+3}},\quad x\to\pm\infty. \tag{10.92}$$

故稳定 PDF 有一个幂律尾巴，$f(x)\propto|x|^{-(\alpha+3)}$. 这个行为明显地与非线性布朗振子以及线性莱维振子是不同的. 如果转向莱维振子的朗之万描写，则“长拖尾”能定性地被解释. 相对于分数阶爱因斯坦–斯莫卢霍夫斯基方程而言，朗之万方法暗示非线性过阻尼振子受白 Lévy 噪声 $Y(t)$ 的影响，它的分布密度函数在 $|Y|\to\infty$ 按 $|Y|^{-1-\alpha}$ 衰减. 长拖尾带来大绝对值的噪声频繁地出现，进而导致位移的大增加. 因为存在势阱，坐标 x 的分布密度函数应该比噪声的分布密度函数下降的快，这防止了逃逸到离原点远处的区域.

10.6.4　非谐莱维振子

简谐莱维振子中的稳定 PDF 具有单峰；而在四次势中稳定分布密度函数含有双峰. 本节将显示在非谐莱维振子中，随着振子参数的改变，单峰向双峰转变. 势函数选作

$$U(x)=\frac{ax^2}{2}+\frac{bx^4}{4},\quad a\geqslant 0. \tag{10.93}$$

引入与以前几节相同的无量纲变量，并且令 $a'=at_0/(m\gamma)$，然后再一次忽略上撇，得到

$$\frac{\partial f}{\partial x}=a\frac{\partial}{\partial x}(xf)+\frac{\partial}{\partial x}(x^3f)+\frac{\partial^\alpha f}{\partial|x|^\alpha}. \tag{10.94}$$

注意这里无量纲的势能函数成为

$$U(x)=\frac{ax^2}{2}+\frac{x^4}{4}, \tag{10.95}$$

仅一个参数 a 被保留. 稳定特性函数满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}^3\hat{f}(k)}{\mathrm{d}k^3}-a\frac{\mathrm{d}\hat{f}}{\mathrm{d}k}=\mathrm{sgn}(k)|k|^{\alpha-1}\hat{f}(k). \tag{10.96}$$

1. 非谐柯西振子的单双模转换

对于柯西情况 $\alpha=1$，解这个方程，在右半轴，边界条件为

$$\hat{f}(0)=1,\quad \frac{\mathrm{d}\hat{f}(0)}{\mathrm{d}k}=0,\quad \hat{f}(k=\infty)=0. \tag{10.97}$$

解是

$$\hat{f}(k)=\frac{1}{z-z^*}\left(-z^*\mathrm{e}^{zk}+z\mathrm{e}^{z^*k}\right), \tag{10.98}$$

其中，z 是如下特征方程的复根

$$z^3-az-1=0, \tag{10.99}$$

$$z=-\frac{u+w}{2}+\mathrm{i}\sqrt{3}\frac{u-w}{2}, \tag{10.100}$$

其中，

$$\begin{aligned}u^3&=\frac{1}{2}\left(1+\sqrt{1-\frac{4a^3}{27}}\right),\\ w^3&=\frac{1}{2}\left(1-\sqrt{1-\frac{4a^3}{27}}\right).\end{aligned} \tag{10.101}$$

令 a_c 为双峰向单峰转换的临界值，这种转换条件为

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=0}=0, \tag{10.102}$$

或者等价于

$$J(a_{\mathrm{c}})=\int_0^{\infty}\mathrm{d}kk^2\hat{f}(k)=0. \tag{10.103}$$

若 $J>0$，则稳定分布密度函数存在单峰；$J<0$，则分布密度函数显现双峰. 将方程 (10.98) 代入方程 (10.103)，得到

$$J=-2\frac{(z+z^*)[z^2+(z^*)^2]}{|zz^*|^3} \tag{10.104}$$

和

$$\mathrm{sgn}J=\mathrm{sgn}(z^2+z^{*2}). \tag{10.105}$$

将 (10.100) 式和 (10.101) 式代入 (10.105) 式，发现

$$\mathrm{sgn}J=-\mathrm{sgn}\left(u^2+w^2-\frac{4}{3}a\right). \tag{10.106}$$

令 $\zeta\equiv 4^{1/3}a_{\mathrm{c}}/3$，从上式得

$$4\zeta=\left(1+\sqrt{1-\zeta^3}\right)^{2/3}+\left(1-\sqrt{1-\zeta^3}\right)^{2/3}. \tag{10.107}$$

方程 (10.107) 的解为 $\zeta=0.419974$，则

$$a_{\mathrm{c}}=0.793701. \tag{10.108}$$

当 $a>a_{\mathrm{c}}$，二次项在势能函数中起主导作用，稳定分布密度函数在原点有一个极大值；相反，当 $a<a_{\mathrm{c}}$，四次项支配了分布密度函数的形态，结果稳定分布密度函数显现双峰且在原点还有一个局域极小.

稳定分布密度函数是由特性函数 (10.98) 式的逆傅里叶变换所获得. 图 10.5 画出了莱维飞行粒子在非谐振子势，在不同参数 a 值下的稳态坐标分布. 清楚地看到，$a=0$ 情况下双峰结果最为明显；随着 a 的增加，双峰被光滑，最终导致单峰.

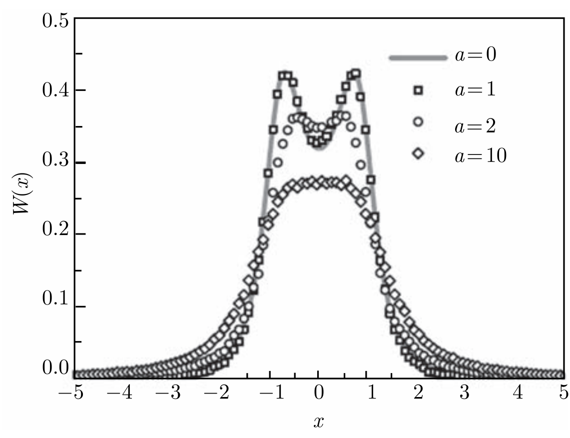


图 10.5 莱维飞行粒子在非谐势中的稳态坐标分布

2. 非谐莱维振子的单双模转换

对 $\alpha \neq 1$ 的一般情况，从 $k \geqslant 0$ 的方程 (10.96) 出发. 用变换

$$\eta(\xi) = k^{(\alpha-1)/3}\hat{f}(\xi), \quad \xi = k^{(\alpha+1)/3}, \tag{10.109}$$

得到关于 $\eta(\xi)$ 的方程：

$$\eta''' - \lambda\eta + a\lambda^{2/3}\left(\eta' - \tilde{\nu}\frac{\eta}{\xi}\right)\xi^{-2\tilde{\nu}} + \frac{A}{\xi^2}\left(\eta' - \frac{\eta}{\xi}\right) = 0, \tag{10.110}$$

其中，

$$\tilde{\nu} = \frac{\alpha-1}{\alpha+2}, \quad A = \frac{(\alpha-1)(\alpha+5)}{(\alpha+2)^2} = \tilde{\nu}\frac{\alpha+5}{\alpha+2}, \quad \lambda = \left(\frac{3}{2+\alpha}\right)^3. \tag{10.111}$$

在下面的分析中，假设 $\tilde{\nu} \ll 1$，即考虑 α 接近 1 的莱维飞行. 注意到 $\tilde{\nu}$ 的极大值出现在 $\alpha = 2$ 处，其为 $\nu_{\max} = 0.25$，小于 1. 这意味着对整个 α 取值区间的近似性都较好. 这一条件可以用来简化 $\eta(\xi)$ 满足的方程. 尤其是假设 $\xi \gg \tilde{\nu}^{1/3}$，方程 (10.110) 左边最后一项 (即含 A 的项) 相对于 $-\lambda\eta$ 项能被忽略. 另外，设 $\xi \ll \exp(1/\tilde{\nu})$，还可以忽略因子 $\xi^{-2\tilde{\nu}}$. 那么在间隔

$$\tilde{\nu} \ll \xi \ll \exp(1/\tilde{\nu}), \tag{10.112}$$

用下列方程

$$\eta''' - a\lambda^{2/3}\eta' = \lambda\eta \tag{10.113}$$

代替方程 (10.110). 其解是

$$\eta(\xi) = \frac{1}{z - z^*}\left[z\exp(z^*\xi) - z^*\exp(z\xi)\right], \tag{10.114}$$

其中，z 是特征方程的复根

$$z^3 - a\lambda^{2/3}z - \lambda = 0, \tag{10.115}$$

结果为

$$z = -\frac{u+w}{2} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}(u-w), \tag{10.116}$$

其中，

$$u = \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{1/3}\left(1 + \sqrt{1 - \frac{4a^3}{27}}\right)^{1/3},$$
$$w = \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{1/3}\left(1 - \sqrt{1 - \frac{4a^3}{27}}\right)^{1/3}. \tag{10.117}$$

利用上节的方法，人们感兴趣下式的符号

$$J = \int_0^\infty \mathrm{d}k k^2 \hat{f}(k) = \frac{3}{\alpha+2}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi \xi^\mu \eta(\xi), \tag{10.118}$$

这里，$\mu = (8-2\alpha)/(\alpha+2)$. 将解 (10.114) 式代入上式，利用积分结果[①]，有

$$J = \frac{3\Gamma(\mu+1)}{(\alpha+2)\mathrm{Im}z \cdot |z|^\mu}\sin[(\mu+2)(\pi-\phi)], \tag{10.119}$$

这里 $\phi = \arg(z)$. 因为

$$\mathrm{sgn}J = \mathrm{sgn}\{\sin[(\mu+2)(\pi-\phi)]\}, \tag{10.120}$$

则双模向单模转换的临界值 a_c 由下式

$$\sin[(\mu+2)(\pi-\phi)] = 0 \tag{10.121}$$

或者

$$(\mu+2)(\pi-\phi) = l\pi, \quad l = 0, 1, 2, \cdots \tag{10.122}$$

定出. 那么 l 的值如何选呢？首先注意到 $l=0$ 对应于 $u=w$ 退化情况. 在 $l=2$ 和 $\alpha=1$ 的情况下，有 $\phi(l=2)=\phi_2=\pi/2$，但这是不合适的，因为 z 必须为负的，所以选 $l=1$，那么

$$\phi_1 = \phi(l=1) = \frac{\pi}{12}(10-\alpha). \tag{10.123}$$

其次，由方程 (10.116) 和 (10.117) 知

$$\cos\phi_1 = -\frac{u+w}{2\sqrt{u^2+w^2-uw}}, \tag{10.124}$$

这是因为

$$uw = -\frac{\lambda^{2/3}}{3}a_\mathrm{c}. \tag{10.125}$$

根据以上两式，有

$$u^2+w^2 = \frac{2}{3}\lambda^{2/3}a_\mathrm{c}\frac{1+2\cos^2\phi_1}{4\cos^2\phi_1-1}. \tag{10.126}$$

令 $\zeta = 4^{1/3}a_\mathrm{c}/3$，并且将方程 (10.117) 代入方程 (10.126)，得到

$$\left(1+\sqrt{1-\zeta^3}\right)^{2/3} + \left(1-\sqrt{1-\zeta^3}\right)^{2/3} = 2\zeta\frac{1+2\cos^2\phi_1}{4\cos^2\phi_1-1}. \tag{10.127}$$

方程 (10.127) 定出了单双模态转换的参数 a 的临界值 a_c. 在 $\alpha=1$ 的特殊情况下，方程 (10.127) 退化为方程 (10.107).

---

① $\int_0^\infty \mathrm{d}\xi \xi^\mu \exp(z\xi) = \exp[\mathrm{i}\pi(\mu+1)]z^{-\mu-1}\Gamma(\mu+1)$.

方程 (10.127) 需要数值求解. 因为 $a_{\mathrm{c}} < 1$，所以若非线性效应是强的，则双模态出现，而不是仅对线性简谐项的小修正. 换句话说，双模态是力场的强非线性产生的效应，对线性问题，例如，线性莱维振子，小的非谐修正并不导致稳定分布密度函数单模态的变化.

10.7　微 扰 方 法

考虑一般情况，将方程 (10.58) 写成一个等价的积分形式

$$\hat{f}(k,t) = \hat{p}_\alpha(k,t) + \int_0^t \mathrm{d}\tau \hat{p}_\alpha(k,t-\tau) \cup_k \hat{f}(k,\tau), \tag{10.128}$$

其中，

$$\hat{p}_\alpha(k,t) = \exp(-|k|^\alpha t) \tag{10.129}$$

为自由 Lévy 飞行的特性函数. 这个关系的获得是将方程 (10.128) 形式上看做一个非均匀的一阶线性微分方程来处理的.

用迭代方法能够形式地求解方程 (10.128). 令

$$\hat{f}^0(k,t) = \hat{p}_\alpha(k,t), \tag{10.130}$$

则

$$\hat{f}^{(1)}(k,t) = \hat{p}_\alpha(k,t) + \int_0^t \mathrm{d}\tau \hat{p}_\alpha(k,t-\tau) \cup_k \hat{f}^{(0)}(k,\tau), \tag{10.131}$$

$$\begin{aligned}\hat{f}^{(2)}(k,t) =& \hat{p}_\alpha(k,t) + \int_0^t \mathrm{d}\tau \hat{p}_\alpha(k,t-\tau) \cup_k \hat{p}_\alpha(k,\tau) \\ &+ \int_0^t \mathrm{d}\tau \int_0^\tau \mathrm{d}\tau' \hat{p}_\alpha(k,t-\tau) \cup_k \hat{p}_\alpha(k,t-\tau') \cup_k \hat{p}_\alpha(k,\tau') \\ &+ \cdots .\end{aligned} \tag{10.132}$$

使用卷积定理

$$A * B = \int_0^t \mathrm{d}\tau A(t-\tau)B(\tau) = \int_0^t \mathrm{d}\tau A(\tau)B(t-\tau) \tag{10.133}$$

和

$$A * B * C = (A * B) * C = A * (B * C), \tag{10.134}$$

给出微扰论的形式解

$$\hat{f}(k,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{p}_\alpha (* \cup_k \hat{p}_\alpha)^n, \tag{10.135}$$

其中，$*$ 代表卷积，$\cup_k \hat{p}_\alpha$ 发挥着相互作用项的功能.

应用拉普拉斯变换，

$$\tilde{\hat{f}}(k,s) = \int_0^\infty \mathrm{d}t \exp(-st) \hat{f}(k,t) \tag{10.136}$$

代入方程 (10.128)，有

$$\tilde{\hat{f}}(k,s) = \tilde{\hat{p}}_\alpha(k,s) + \tilde{\hat{p}}_\alpha(k,s) \cup_k \tilde{\hat{f}}(k,s) \tag{10.137}$$

其中，

$$\tilde{\hat{p}}_\alpha(k,s) = \frac{1}{s+k^\alpha} \tag{10.138}$$

是均匀莱维稳定分布密度函数的傅里叶–拉普拉斯变换. 最终获得解 (10.128) 在 (k,s) 空间的形式

$$\tilde{\hat{f}}(k,s) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\tilde{\hat{p}}_\alpha(k,s) \cup_k\right]^n \tilde{\hat{p}}_\alpha(k,s). \tag{10.139}$$

这种关于分数阶福克尔–普朗克方程解的迭代构造方案将在下面得以运用.

10.7.1 分叉时间的存在

在单峰初始条件 $f(x,0) = \delta(x)$ 情况下，现证明存在一个从单峰分布密度函数向双峰转换的有限分叉时间 t_{12}，同时，在原点的曲率为零，即是一个反射点：

$$\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x=0,t=t_{12}} = 0. \tag{10.140}$$

引入

$$J(t) = \int_0^\infty \mathrm{d}k k^2 \hat{f}(k,t), \tag{10.141}$$

因为特性函数是一个偶函数，所以方程 (10.140) 等价于

$$J(t_{12}) = 0. \tag{10.142}$$

分叉时间能从方程 (10.139) 的迭代解而获得；这里考虑 $c=4$，一级近似为

$$\tilde{\hat{f}}_1(k,s) = \frac{1}{s+k^\alpha}\left(1 + \cup_k \frac{1}{s+k^\alpha}\right), \tag{10.143}$$

其中，

$$\cup_k = k\frac{\partial^3}{\partial k^3}. \tag{10.144}$$

将以上两式相结合，有

$$\tilde{\hat{f}}_1(k,s) = \frac{1}{s+k^\alpha} + \alpha(\alpha-1)(2-\alpha)\frac{k^{\alpha-2}}{(s+k^\alpha)^3} + 6\alpha^2(\alpha-1)\frac{k^{2\alpha-2}}{(s+k^\alpha)^4}$$
$$-6\alpha^3\frac{k^{3\alpha-2}}{(s+k^\alpha)^5}, \tag{10.145}$$

经过逆拉普拉斯变换，

$$\hat{f}_1(k,t) = \exp(-k^\alpha t)\left\{1 - \frac{\alpha^3}{4}t^4k^{3\alpha-2} + \alpha^2(\alpha-1)t^3k^{2\alpha-2}\right.$$
$$\left.+\alpha(\alpha-1)(2-\alpha)\frac{t^2}{2}k^{\alpha-2}\right\}. \tag{10.146}$$

分叉时间 t_{12} 的一级近似由方程 (10.141) 确定，即要计算

$$\int_0^\infty \mathrm{d}k k^2 \hat{f}_1(k, t_{12}^{(1)}) = 0, \tag{10.147}$$

得到

$$t_{12}^{(1)} = \left[\frac{4\Gamma(3/\alpha)}{3(3-\alpha)\Gamma(1/\alpha)}\right]^{\alpha/(2+\alpha)}. \tag{10.148}$$

10.7.2 $c > 2$ 的稳定解非单一峰的证明

现说明方程 (10.53) 的稳定解有一个非单一峰的态. 为此目的，利用分数阶里斯导数的一种表示式

$$\frac{\mathrm{d}^\alpha f(x)}{\mathrm{d}|x|^\alpha} \equiv \Gamma(1+\alpha)\frac{\sin(\alpha\pi/2)}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi \frac{f(x+\xi)-2f(x)+f(x-\xi)}{\xi^{1+\alpha}}, \quad 0<\alpha<2. \tag{10.149}$$

其实，这种定义对于 $\alpha \neq 1$ 时，可以从定义 (10.48) 式的正则化后用到方程 (10.50) 而获得. 在稳定态 ($\partial f/\partial t = 0$), 由方程 (10.53) 得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\mathrm{sgn}(x)|x|^{c-1}f_{\mathrm{st}}\right] + \frac{\mathrm{d}^\alpha f_{\mathrm{st}}}{\mathrm{d}|x|^\alpha} = 0. \tag{10.150}$$

或者，从定义 (10.149) 式出发，并考虑到 $f_{\mathrm{st}}(x)$ 是一个偶函数，有

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\xi \frac{f_{\mathrm{st}}(\xi) - f_{\mathrm{st}}(0)}{\xi^{1+\alpha}} = 0. \tag{10.151}$$

根据后一关系，分以下两步直接证明 f_{st} 的非单峰性:

(1) 假设稳定分布密度函数 $f_{\mathrm{st}}(x)$ 是单峰的，由于 $x \to -x$ 的对称性，那么就需要 $f_{\mathrm{st}}(x)$ 在 $x=0$ 处有极大值. 在这种情况下，方程 (10.151) 左边的积分必须为负，但这与其等于零矛盾，故 $f_{\mathrm{st}}(x)$ 为非单峰.

(2) 另外，还排除 $f_{\text{st}}(0)=0$，那么在这一背景下，积分将是正的，其再一次与方程 (10.151) 矛盾.

当 $x\to\infty$，则 $f(x)\to 0$. 基于以上两点事实，可以给出一个结论：最简单的情形发生，对于 ξ_0 而言，有如下的性质存在，

$$\int_{\xi_0}^{\infty}\mathrm{d}\xi\frac{f(\xi)-f(0)}{\xi^{1+\alpha}}<0, \tag{10.152}$$

$$\int_{0}^{\xi_0}\mathrm{d}\xi\frac{f(\xi)-f(0)}{\xi^{1+\alpha}}>0, \tag{10.153}$$

这就是对于所有 $c>2$ 稳定分布密度函数存在两个峰丘的条件.

10.7.3 稳定解的幂律渐近形式

对于 $c\geqslant 2$，当 $x\to+\infty$，可以合理地假设

$$D_{-}^{\alpha}f_{\text{st}}\ll D_{+}^{\alpha}f_{\text{st}}, \tag{10.154}$$

这是因为右边黎曼–刘维尔导数 $(D_{-}^{\alpha}f_{\text{st}})(x)$ 的积分区域 (x,∞) 远小于左边黎曼–刘维尔导数 $(D_{+}^{\alpha}f_{\text{st}})(x)$ 的积分区域 $(-\infty,x)$，$f_{\text{st}}(x)$ 的主要部分总是在一个局部的范围内变化. 在大 x，得到稳定态

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[U'(x)f_{\text{st}}\right]-\frac{1}{2\cos(\pi\alpha/2)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\int_{-\infty}^{x}\frac{f_{\text{st}}(\xi)\mathrm{d}\xi}{(x-\xi)^{\alpha-1}}\cong 0. \tag{10.155}$$

这对应于如下的近似等式

$$x^{c-1}f_{\text{st}}(x)\cong\frac{1}{2\cos(\pi\alpha/2)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\int_{-\infty}^{x}\frac{f_{\text{st}}(\xi)\mathrm{d}\xi}{(x-\xi)^{\alpha-1}}. \tag{10.156}$$

希望寻找 $f_{\text{st}}(x)$ 具有形式 $f(x)\approx C_1/x^{\mu}$ $(x\to+\infty,\mu>0)$ 的渐进行为. 对方程 (10.156) 两边积分，有

$$\frac{2C_1\cos(\pi\alpha/2)\Gamma(2-\alpha)}{-\mu+\alpha}x^{-\mu+c}\cong\int_{-\infty}^{x}\frac{f_{\text{st}}(\xi)\mathrm{d}\xi}{(x-\xi)^{\alpha-1}}. \tag{10.157}$$

右边的积分能够通过下式而近似求出

$$\frac{1}{x^{\alpha}-1}\int_{-\infty}^{x}f_{\text{st}}(\xi)\mathrm{d}\xi\cong\frac{1}{x^{\alpha}-1}\int_{-\infty}^{\infty}f_{\text{st}}(\xi)\mathrm{d}\xi=\frac{1}{x^{\alpha-1}} \tag{10.158}$$

确定 x 的幂指数和前置因子:

$$\mu=\alpha+c-1 \tag{10.159}$$

和

$$C_1=\frac{\sin(\pi\alpha/2)\Gamma(\alpha)}{\pi}. \tag{10.160}$$

鉴于分布密度函数的对称性，对于所有 $c \geqslant 2$，重写分布密度函数的渐进式

$$f(x) \approx \frac{\sin(\pi\alpha/2)\Gamma(\alpha)}{\pi|x|^{\mu}}, \quad x \to \pm\infty. \tag{10.161}$$

讨论

(1) 尽管 (10.161) 式是近似的，但这一渐进形式对任何 $c \geqslant 2$，精确地与以前获得的结果相匹配，例如，简谐莱维飞行 (或称线性莱维振子)$c = 2$ 的精确结果 (Jespersen et al.，1999)；文献 (Chechkin et al.，2002) 和 (Chechkin et al.，2003) 的四次莱维振子 $c = 4$ 结果；以及偶幂律指数情况 (Chechkin et al.，2002).

(2) 前置因子 C_1 与势指数 c 无关，在这个意义上，C_1 是普适的.

(3) 对于每个莱维指标 α，存在一个临界值

$$c_{\text{cr}} = 4 - \alpha, \tag{10.162}$$

若 $c < c_{\text{cr}}$，方差 $\langle x^2 \rangle$ 为无限；若 $c > c_{\text{cr}}$，方差 $\langle x^2 \rangle$ 有限.

(4) 其实这里用逆幂级数，为构造大 x 的稳定解给出了一个相当简单的方案.

小结

(1) 稳定分布密度函数的双峰结构在 $\alpha = 1$ 最为明显，随着 α 值的增加，这个效应减弱，当 $\alpha = 2$ 是双峰消失；另外，对于非谐莱维振子，随着参数 a 的增加，双模态被光滑抹平，在 a 的临界，转变成单模.

(2) 设莱维噪声指数为 α，偶次势指数为 $2m + 2$，则稳定分布密度函数有 $|x|^{-(\alpha+2m+1)}$ $(|x| \to \infty)$ 的幂律渐进行为. 那么对于非线性莱维振子 $(m > 0)$，方差有限；势越陡，分布密度函数衰减得越快，进而莱维飞行变短.

以上两点充分说明了莱维噪声驱动的系统的普遍特性，扮演着试图在理论上解释非吉布斯统计的挑战.

第 11 章　非广延统计力学

本章导读：介绍引入非广延统计的必要性; 在总能量和总粒子数守恒的约束下推导出 q-指数函数; 讨论非广延统计热力学与反常扩散之间的关系.

热力学是物理学的一个基本分支，其给出了温度、压强、体积、能量、熵和其他与热现象有关的态函数之间的关系，发挥描写宏观世界的重要作用；统计物理则将热力学与微观世界相连系，试图用组成系统的微观态的概率分布来解释热力学规律. 其中最重要的两个物理量是能量和熵，它们一起构造了统计力学的基础，前者与一个力学状态的可能性有关，后者确认了系统可能状态的一组概率. 熵最初是由克劳修斯 (Clausius) 在热力学中定义的，其连接了宏观和微观世界. 它的最基本的形式是自然对数，首先由玻尔兹曼引入，后来重新被吉布斯、冯 · 诺伊曼 (von Neumann)、香农 (Shannon) 和 Jaynes 等发现. 熵的公理性表示式为

$$S_{\mathrm{BG}} \equiv -k\sum_{i=1}^{W} p_i \ln p_i, \quad \sum_{i=1}^{W} p_i = 1, \tag{11.1}$$

其中，k 是一个正常量，在热力学与统计物理学中，它就是玻尔兹曼普适常量 k_{B}；在信息理论中它等于 1；p_i 为系统取第 i 个微观态的概率；脚标代表玻尔兹曼–吉布斯统计 (BG). 对于所有微观态取等概率的特殊情况，即 $p_i = W^{-1}$，这里 W 是系统可能的微观态的总数，有

$$S_{\mathrm{BG}} = k\ln W. \tag{11.2}$$

对于连续变量，BG 熵被写作

$$S_{\mathrm{BG}} \equiv -\int \mathrm{d}x p(x)\ln p(x), \quad \int \mathrm{d}x p(x) = 1. \tag{11.3}$$

由玻尔兹曼和吉布斯建立起来的传统统计力学也称为广延统计力学，即热力学态函数为可加量. 所谓广延量指的是正比于系统的总质量或总粒子数的量，表现为可加性. 这忽略了分子间的相互作用，亦是近独立近似的结果. 然而，若考虑分子的长程相互作用时，则内能不是广延量. 对于化学纯物质，其总能量为分子的动能与分子间的相互作用能之和，$E = \sum\limits_{i=1}^{N}\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}_i^2 + \frac{1}{2}\sum\limits_{i\neq j}^{N} u_{ij}$，体系的内能即为平均能量：$U = \bar{E} = \frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T + \frac{1}{2}N(N-1)\bar{u}$，其中，$\bar{u}$ 表示两个分子之间的相互作用势能

的平均值. 显然，第二项是一个非广延量.

11.1 Tsallis 熵和 Tsallis 分布

自从玻尔兹曼建立熵概念以后，许多熵形式被引入了. 1998 年, 巴西物理学家 C. Tsallis(查理斯) 建立了非广延熵和统计[①]，被誉为查理斯学派.

11.1.1 非加性熵和非广延统计

为了克服那些困难，查理斯提出了一个方案，就是广义熵:

$$S_q \equiv \frac{1-\sum_{i=1}^{W} p_i^q}{q-1} \quad \left(\sum_{i=1}^{W} p_i = 1, \quad q \in R; \quad S_1 = S_{\mathrm{BG}}\right). \tag{11.4}$$

对于连续变量，有

$$S_q \equiv \frac{1-\int \mathrm{d}x[p(x)]^q}{q-1}, \quad \int \mathrm{d}x p(x) = 1. \tag{11.5}$$

这是广义 BG 统计力学 (也称非广延统计力学) 的基础. 对于等概率特殊情况，即 $p_i = 1/W$，方程 (11.4) 成为

$$S_q = k\frac{W^{1-q}-1}{1-q}. \tag{11.6}$$

引入 q 对数函数

$$\ln_q z \equiv \frac{z^{1-q}-1}{1-q} \quad (z>0;\ \ln_1 z = \ln z), \tag{11.7}$$

则

$$\mathrm{e}_q^z \equiv [1+(1-q)z]^{1/(1-q)} \quad (\mathrm{e}_1^z = \mathrm{e}^z). \tag{11.8}$$

方程 (11.4) 和 (11.6) 分别重写为

$$S_q = -k\sum_{i=1}^{W} p_i^q \ln_q p_i \tag{11.9}$$

和

$$S_q = k\ln_q W. \tag{11.10}$$

① Tsallis C. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics, J Stat Phys, 1998, 52: 479.

11.1.2 可加性与广延性[①]

使用 Penrose 关于熵的可加性的定义，即如果任何两个概率无关的系统 A 和 B，也就是 $p_{i,j}^{A+B}=p_i^A p_j^B$，熵是可加的，那么

$$S(A+B)=S(A)+S(B), \tag{11.11}$$

其中，$S(A+B)\equiv S(\{p_{ij}^{A+B}\})$，$S(A)\equiv S(\{p_i^A\})$，$S(B)\equiv S(\{p_j^B\})$.

从定义 (11.4) 式，易看出对于两个概率无关的系统 A 和 B，在概率意义上，$A+B$ 能劈裂成 A 和 B 两部分，有

$$\frac{S_q(A+B)}{k}=\frac{S_q(A)}{k}+\frac{S_q(B)}{k}+(1-q)\frac{S_q(A)}{k}\frac{S_q(B)}{k}. \tag{11.12}$$

因为所有情况下，$S_q\geqslant 0$，那么 $q<1$、$q=1$ 和 $q>1$ 分别对应于超加性 (超广延)、加性 (广延) 和欠加性 (欠广延). 所以，S_{BG} 是加性的，而 S_q $(q\neq 1)$ 是非加性的.

11.1.3 q− 指数统计分布

在如下的归一化和能量守恒

$$\sum_{i=1}^{W}p_i=1,\quad \frac{\sum\limits_{i=1}^{W}p_i^q E_i}{\sum\limits_{i=1}^{W}p_i^q}=U_q, \tag{11.13}$$

两个约束下，这里，U_q 称为广义内能, 去最佳化 S_q[方程 (11.4)], 这对应于 q 平均值，等价地

$$\sum_{i=1}^{W}p_i^q(E_i-U_q)=0. \tag{11.14}$$

用拉格朗日乘子求极值方法，定义一个量:

$$\varPhi_q\equiv S_q+\alpha\left[\sum_{i=1}^{W}p_i-1\right]-\beta\left[\sum_{i=1}^{W}p_i^q(E_i-U_q)\right], \tag{11.15}$$

极值条件 $\delta\varPhi_q/\delta p_j=0$，得出

$$p_j=\left(\frac{q}{\alpha}\right)^{1/(1-q)}\mathrm{e}_q^{-\beta(E_j-U_q)}\quad (j=1,2,\cdots,W). \tag{11.16}$$

用归一化条件，$\sum\limits_{i=1}^{W}p_i=1$，消除参数 α，以致获得广义权重

① 非广延一词的含义是与长程相互作用的力学系统的总能量是一个非广延量相对应的，相反，短程相互作用系统，它的总能量在热力学意义下是广延的.

$$p_i = \frac{e_q^{-\beta(E_j - U_q)}}{Z_q} \quad (i = 1, 2, \cdots, W), \tag{11.17}$$

式中，

$$Z_q(\beta) = \sum_{j=1}^{W} e_q^{-\beta(E_j - U_q)}. \tag{11.18}$$

这个概率分布 (11.17) 式对应于一个极大 $S_q(q > 0)$ 或极小 $S_q(q < 0)$. 当 $q = 0$，熵为一常数，$S_0 = W - 1$.

11.1.4 更一般约束下的分布

现在假设约束是更一般的，即

$$\langle x \rangle_q = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx x[p(x)]^q}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx [p(x)]^q} = C_q, \tag{11.19}$$

$$\langle (x - \langle x \rangle_q)^2 \rangle_q = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx (x - \langle x \rangle_q)^2 [p(x)]^q}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} dx [p(x)]^q} = D_q, \tag{11.20}$$

对应于极大 S_q 的分布是

$$p(x) = A_q \sqrt{\beta} e_q^{-\beta(x - \langle x \rangle_q)^2}, \tag{11.21}$$

其中，$A_q = \sqrt{(q-1)/\pi}\,\Gamma(1/(q-1))/\Gamma((3-q)/[2/(q-1)])\ (q > 1)$.

利用约束 (11.20) 式，可得 $\beta = 1/[(3-q)D_q]$，代入方程 (11.21)，有

$$p(x) = \begin{cases} \dfrac{A_q}{\sqrt{(3-q)D_q}} \dfrac{1}{\left[1 + \dfrac{q-1}{(3-q)D_q}(x - C_q)^2\right]^{1/(q-1)}}, & q > 1; \\ \dfrac{A_q}{\sqrt{(3-q)D_q}} \left[1 - \dfrac{1-q}{(3-q)D_q}(x - C_q)^2\right]^{1/(1-q)}, & q < 1. \end{cases} \tag{11.22}$$

在 $q < 1$ 情况下，分布是很紧凑的，在 $|x - C_q| \leqslant \sqrt{(3-q)D_q/(1-q)}$ 之外，其消失.

若 $\langle x \rangle_q = 0$，则分布式 (11.21) 和式 (11.22) 分别具有如下简单的形式

$$p(x) = A_q \sqrt{\beta} e_q^{-\beta x^2}, \tag{11.23}$$

$$p(x) = \frac{A_q}{\sqrt{(3-q)D_q}\, e_q^{-x^2/[(3-q)D_q]}}. \tag{11.24}$$

这些分布分别为学生 t-分布 $(q > 1)$ 和 r 分布 $(q < 1)$ 的解析扩展. 自然地，对于 $q > 1$ 存在一个渐进长幂律拖尾，以及 $q < 1$ 有一个紧凑支撑. $q = 3$ 为 q 取值的上限，并且，约束 (11.20) 式有一个成为有限的上确界，也是 $q = 3$.

11.1.5 分数阶媒介中的扩散

为了获取自由粒子方均位移与时间的分数阶幂成正比的反常扩散的结果，一种途径是将正常扩散方程进行如下的推广

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2[p(x,t)]^\nu}{\partial x^2}, \tag{11.25}$$

这称为分数阶媒介. 在初始条件 $p(x,0) = \delta(x)$ 下，该方程的精确解为

$$p(x,t) = \frac{A_q}{\sqrt{3-q}(\mathrm{D}t)^{1/(3-q)}}\mathrm{e}_q^{-x^2/[(3-q)(\mathrm{D}t)^{2/(3-q)}]}, \tag{11.26}$$

这里

$$q = 2 - \nu < 3. \tag{11.27}$$

若 $\nu > 0$，则 $D > 0$；若 $\nu < 0$，则 $D < 0$.

如果初始分布不是 δ 分布，那么任何时刻的分布也就不同于 (11.26) 式，不过，$t \to \infty$ 渐进分布是相同的. 换句话说，解 (11.26) 式在分布空间构成了一个吸引子. 当 $q < 3$，x 标度为 $t^{1/(3-q)}$. 在所有的 $q < 5/3$ 情况下，$p(x,t)$ 的二次矩有限，即

$$\langle x^2 \rangle \propto t^{2/(3-q)}.$$

而对于 $5/3 < q < 3$，什么情况发生呢？$t^{2/(3-q)}$ 前的因子发散，这时应该关注于分布的宽度，或者等价地，$\langle x^2 \rangle_q$，其定义为

$$\langle x^2 \rangle_q = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} x^2[p(x)]^q \mathrm{d}x}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} [p(x)]^q \mathrm{d}x}. \tag{11.28}$$

11.2 反常扩散的热力学

查理斯在 1988 年建立的广义统计力学，事实上也提供了发展反常扩散系统热力学的框架. 本节在此框架下，计算方均位移作为时间的函数，并且以莱维飞行无规行走为对象，推广爱因斯坦的扩散系数与温度的关系.

现考虑在温度为 T 背景下的一组莱维行走者. 假设在碰撞期间 τ，每个粒子的速度 v 为一个常量，一个长度为 x 的跳跃被完成了，则 $x = v\tau$，所以粒子动能

$\epsilon = \frac{1}{2}mv^2$，这里 m 为粒子质量. 沿着一个单粒子轨迹的动能 ϵ 的概率分布 $p(\epsilon)$，即单粒子能量态的平衡分布，与跳跃长度 x 分布 $p(x)$ 之间的关系为：$g(\epsilon)p(\epsilon)\mathrm{d}\epsilon = p(x)\mathrm{d}x$，这里 $g(\epsilon)$ 为自由粒子在 d 维空间的态密度，$p(x)$ 为莱维飞行的跳跃长度分布，有

$$p(\epsilon) = N_\epsilon \left(1 + \frac{2\tau^2}{mx_0^2}\epsilon\right)^{-(d+\gamma)/2}, \tag{11.29}$$

$p(x)$ 选柯西函数形式：

$$p(\boldsymbol{x}) = \frac{N_x}{(x_0^2 + x^2)^{(d+\gamma)/2}}, \tag{11.30}$$

其中，$x = |\boldsymbol{x}|$，x_0 为测量距离长度的标度. 可见，$p(\epsilon)$ 并不是一个吉布斯–玻尔兹曼分布，但可从查理斯广义统计力学 (TGSM) 导出.

查理斯广义统计力学的基础是一个微观态 i 的概率为 p_i 的系统，其平衡熵的一种定义为

$$S_q = k\frac{1 - \sum_i p_i^q}{q - 1}. \tag{11.31}$$

为了发现概率 p_i 作为第 i 态能量的函数，在概率守恒 $\sum_i p_i = 1$ 和平均能量为一常量的条件下，应使熵 S_q 相对于 p_i 取极大，

$$\sum_i p_i^q \epsilon_i = E_q = \text{常量}. \tag{11.32}$$

在这两个约束条件下，若广义熵极大，则给出

$$p_i = p(\epsilon_i) = A[1 + \beta(q-1)\epsilon_i]^{-1/(q-1)}. \tag{11.33}$$

比较方程 (11.29) 和 (11.33)，可清楚地看到

$$q = 1 + \frac{2}{d+\gamma}, \tag{11.34}$$

注意 $q > 1$. 在此种特殊的扩散中，温度参量被确定为

$$\beta = \frac{2\tau^2}{(q-1)mx_0^2}. \tag{11.35}$$

在 TGSM 意义下，按照方程 (11.32)，一个莱维飞行单步方均位移定义为

$$\langle x^2 \rangle_q = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p(\boldsymbol{x})^q \mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{11.36}$$

它是有限的. 其实，按照方程 (11.34)，对于大 x，有

$$x^2 x^{d-1} p(\boldsymbol{x})^q \sim x^{2+d-1} x^{-2-d-\gamma} \sim x^{-(1+\gamma)} \sim x^{-1},$$

然而，若用通常的统计，则莱维行走的方均位移发散.

这个事实意味着，TGSM 能够在不作盒子近似情况下，来计算 n-步莱维飞行的方均位移 $\langle x_n^2 \rangle_q$，然后将它与流逝的时间联系起来. 那么

$$\langle x_n^2 \rangle_q = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 p_n(\boldsymbol{x})^q \mathrm{d}\boldsymbol{x}, \tag{11.37}$$

其中，$p_n(\boldsymbol{x})$ 为 n 步以后，在 $\boldsymbol{x}$ 发现行走者的概率. 这个概率密度在傅里叶表象中是容易得到的，$p_n(\boldsymbol{k}) = p(\boldsymbol{k})^n$，这里 $p(\boldsymbol{k})$ 是 $p(\boldsymbol{x})$ 的傅里叶变换.

对于 $\boldsymbol{k} \to 0$，方程 (11.30) 的傅里叶变换的行为是 $p(\boldsymbol{k}) \simeq 1 - ak^{\gamma_0}[\gamma_0 = \min(\gamma, 2)]$，$a$ 为一常量. 它的 n 次幂满足

$$p^n(\boldsymbol{k}) \approx 1 - ank^{\gamma_0} \approx \tilde{p}(n^{1/\gamma_0}\boldsymbol{k}), \tag{11.38}$$

其中，标度函数 $\tilde{p}(\boldsymbol{k})$ 与 $p(\boldsymbol{k})$ 有相同的渐进行为. 对这个标度函数 $p_n(\boldsymbol{k})$ 进行逆变换，其在大 x 为

$$p_n(\boldsymbol{x}) \approx n^{-d/\gamma_0} \tilde{p}(n^{-1/\gamma_0}\boldsymbol{x}). \tag{11.39}$$

考虑方程 (11.37)，有

$$\langle x_n^2 \rangle_q \approx n^{[2-(q-1)d]/\gamma_0} \langle \tilde{x}^2 \rangle_q, \tag{11.40}$$

这里，$\langle \tilde{x}^2 \rangle_q$ 为标度函数 $\tilde{p}(\boldsymbol{x})$ 相对应的平方平均位移.

假设对于大 x，$\tilde{p}(\boldsymbol{x}) = p(\boldsymbol{x})$，容易显示 $\langle \tilde{x}^2 \rangle = K(q,d)x_0^2$，这里系数 $K(q,d)$ 依赖于指数 q 和维数 d. 此外，步数 n 等于 $n = t/\tau$. 将这些代入方程 (11.40)，得到莱维飞行的方均位移作为时间的函数:

$$\langle x^2(t) \rangle_q = D_q t^\alpha, \tag{11.41}$$

其中，

$$D_q = \frac{2K(q,d)}{q-1} \frac{\tau^{2-\alpha}}{m\beta}, \tag{11.42}$$

$$\alpha = \frac{2-(q-1)d}{\gamma_0} = \begin{cases} q-1, & \gamma < 2; \\ 1-(q-1)d/2, & \gamma > 2. \end{cases} \tag{11.43}$$

在非广延统计意义下，任何可观测量的平均定义为

$$\langle O \rangle_q = \frac{\sum\limits_{j=1}^{W} O_j p_j^q}{\sum\limits_{j=1}^{W} p_j^q}. \tag{11.44}$$

热力学关系与平衡态统计热力学一致，例如，

$$\frac{1}{T}=\frac{\partial S_q}{\partial U_q},\quad F_q=U_q-TS_q,\quad C_q=T\frac{\partial S_q}{\partial T}. \tag{11.45}$$

方程 (11.45) 将反常扩散特性与热力学量和温度发生关联，也将 Tsallis 统计与莱维飞行联系起来. 反常扩散指数 α 是查理斯统计指标 q 的函数，当 $q\to 1$，回到正常扩散 $\alpha=1$.

讨论

玻尔兹曼–吉布斯统计力学是实际问题的理想化，体现了由大量粒子组成的热力学系统的统计规律性. 但要作出一些基本假设：① 孤立系统的等概率假设；② 广延量假设；③ 好函数默认 (态函数、态参量连续，可导). 等概率假设实质上忽略了时间关联，广延量假设忽略了空间关联，好函数默认导致相变困难.

非广延统计力学中 Tsallis 统计、非完整统计等，引入了非广延参数 q. 对 Tsallis 统计，当 $q\to 1$，完全过渡到广延统计力学. 由于时空关联等造成的非广延性完全由参数 q 带来的，这使得问题归结为参数 q 的数值上，无疑是有缺陷的. 因为 q 的值无法事先知道，它反映不出具体的物理实质，而是通过与实验结果和事实相符来调节的. 所以，非广延统计力学仍处于需要进一步完善的阶段.

习　　题

11-1　证明系统的内能为一个广延量，即

$$U_q(A+B)=U_q(A)+U_q(B).$$

11-2　在 $\sum_{i=1}^{W}p_i\varepsilon_i=U^{(1)}$ 能量约束下，通过对广义熵极大化，证明所得到的稳定分布是

$$p_i^{(1)}=\frac{[1-(q-1)\beta^*\varepsilon_i]^{1/(q-1)}}{\sum_{j=1}^{W}[1-(1-q)\beta^*\varepsilon_j]^{1/(q-1)}}.$$

注意，这里 β^* 并不对应于内部能量约束的拉格朗日乘子.

11-3　如果能量约束改为 $\sum_{j=1}^{W}p_j^q\varepsilon_j=U_q^{(2)}$，则分布律为

$$p_j^{(2)}=\frac{[1-(1-q)\beta\varepsilon_j]^{1/(1-q)}}{\sum_{j=1}^{W}[1-(1-q)\beta\varepsilon_j]^{1/(1-q)}},$$

这里的分母为配分函数.

11-4　在上题的统计意义下，系统的内能不是一个广延量，即

$$U_q^{(2)}(A+B)=U^{(2)}(A)+U^{(2)}(B)+(1-q)[U_q^{(2)}(A)S_q(B)/k+U_q^{(2)}(B)S_q(A)/k].$$

11-5　试在非广延分布下，求能量表示式

$$E=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m}\left(p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2\right),$$

单原子分子理想气体的配分函数和内能.

第 12 章　数 值 算 法

本章导读：用快速傅里叶变换技巧模拟具有任意谱分布的色噪声，可称为噪声发生器，这为数值求解无法扩展为高维马尔可夫过程的广义朗之万方程提供了唯一途径. 以非欧姆摩擦为例，显示欠扩散、正常扩散和超扩散的图像. 将时间关联推广到空间关联，模拟粒子在随机关联势中的欠扩散行为. 在介绍数值求分数阶导数和积分后，还建立连续时间随机行走模型的蒙特卡罗模拟方案.

12.1　噪声产生器

反常扩散是指自由粒子的长时间方均位移表示为

$$\langle x^2(t)\rangle = 2D_\delta t^\delta,$$

其中，$0<\delta<1$ 为欠扩散；$\delta=1$ 是正常扩散；$1<\delta<2$ 为超扩散. 从数学上看，反常扩散来自于时间和空间的非局域性，而描写这一运动的主要手段有：连续时间无规行走、莱维飞行、分数阶福克尔–普朗克方程、广义朗之万方程和随机关联势等. 其中第二种和第三种方法分别用来描写超扩散和欠扩散，数学上比较困难；而第一种和第四种方法可以统一地描写幂指数 $0<\delta<2$ 之间的所有扩散过程. 本章将在数值上实现这两种方法所描写的动力学，并应用到周期势场之中.

12.1.1　离散傅里叶变换产生任意色噪声

有些色噪声的关联函数是已知的，但无法确定由高斯白噪声驱动怎样的线性朗之万方程来产生，那么就不能用第 4 章的方法来模拟该噪声. 对于这种色噪声，可以用离散傅里叶变换的方法来生成：对噪声关联函数作傅里叶变换，在离散的傅里叶空间中产生一个噪声序列，再经过离散傅里叶逆变换得到需要的噪声序列 (Garcia et al., 1989, 1992; Zhuo et al., 2006).

12.1.2　时间关联噪声的模拟

一维变量的傅里叶变换和逆变换的定义为

$$\eta(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \eta(t)\exp(-\mathrm{i}kt)\mathrm{d}t,$$

$$\eta(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \eta(k)\exp(\mathrm{i}kt)\mathrm{d}k. \tag{12.1}$$

它们的离散傅里叶变换和逆变换形式是

$$\eta_\mu = \Delta t \sum_{m=0}^{N-1} \eta_m \exp\left(-\mathrm{i}\frac{2\pi}{N} m\mu\right), \quad \mu = 0, 1, \cdots, N-1,$$

$$\eta_m = \frac{1}{N\Delta t} \sum_{\mu=0}^{N-1} \eta_\mu \exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi}{N} m\mu\right), \quad m = 0, 1, \cdots, N-1, \tag{12.2}$$

其中，N 是离散时间的格点数 (取为 2 的整数次幂)，Δt 是时间间隔. 离散傅里叶变换与连续傅里叶变换的对应关系是

$$t = m\Delta t, \quad k = \frac{2\pi}{N\Delta t}\mu.$$

若要模拟的色噪声的关联函数是

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = g(|t - t'|), \tag{12.3}$$

则在傅里叶空间中噪声的关联函数为

$$\langle \eta(k)\eta(k') \rangle = 2\pi g(k)\delta(k + k'), \tag{12.4}$$

这里 $g(k)$ 是 $g(t)$ 的傅里叶变换. (12.4) 式的离散形式为

$$\langle \eta_\mu \eta_\nu \rangle = N\Delta t g_\mu \delta_{\mu, N-\nu}, \tag{12.5}$$

其中，g_μ 是 $g(k)$ 的离散形式，并且具有对称性：$g_\mu = g_{N-\mu} = g(k)$.

由关联式 (12.5)，可以在离散傅里叶空间中产生一个高斯分布的噪声序列：

$$\eta_\mu = \sqrt{N\Delta t g_\mu}\alpha_\mu, \tag{12.6}$$

其中，α_μ 是平均值为零的高斯分布随机数 (复数). 为了使噪声序列 η_μ 具有 (12.5) 式的关联形式，α_μ 必须满足 $\langle \alpha_\mu \alpha_\nu \rangle = \delta_{\mu, N-\nu}$.

欲实现这种关联，可由以下方法产生 α_μ：

$$\alpha_0 = a_0, \quad \alpha_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu + \mathrm{i}b_\mu),$$

$$\alpha_{\frac{N}{2}} = b_0, \quad \alpha_{N-\mu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu - \mathrm{i}b_\mu), \quad \mu = 1, 2, \cdots, N/2 - 1 \tag{12.7}$$

其中，a_μ、b_μ 是相互独立、平均值为零、方差为 1 的高斯随机数 (实数). 要产生 N 个离散时间的噪声，需要 N 个独立的高斯随机数.

最后将 η_μ 作逆变换便得到一个色噪声序列. 由于离散傅里叶变换的对称性，用这种方法产生的色噪声序列的实际关联具有对称性：当 $m < N/2$ 时，$g(m\Delta t)$ 近

似等于理论值，当 $m > N/2$ 时，$g(m\Delta t) = g[(N-m)\Delta t]$. 所以对于同一条随机轨道，最多只用一个噪声序列的一半. 为了减少计算量，一个噪声序列可以用于两个粒子轨道的模拟：一个粒子用序列的前一半，另一个粒子用序列的后一半.

在图 12.1 中，我们用快速傅里叶变换得到了高斯关联色噪声的模拟结果，并与理论值进行了比较，这里色噪声的时间关联函数取为

$$g(t) = g_0 \exp\left(-\frac{t^2}{2\lambda^2}\right). \tag{12.8}$$

由此可见，本算法是成功的.

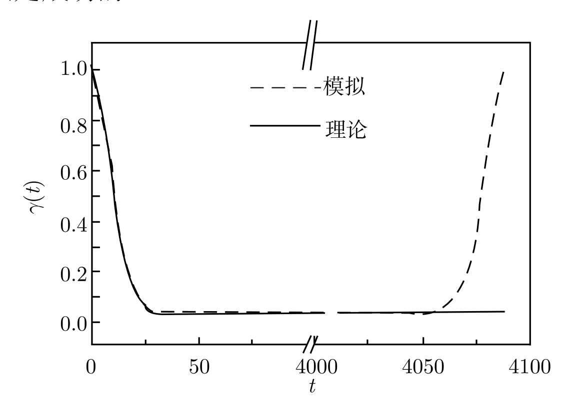


图 12.1　高斯关联色噪声的模拟结果与理论值的比较

虚线和实线分别是数值结果和理论值. 模拟所用的参数是 $N = 4096$，$\Delta t = 1$，$g_0 = 1.0$, $\lambda = 10.0$

讨论

(1) 对于白噪声，可以用高斯随机数来模拟它对一个时间步长积累的冲量；而有些色噪声可以用一个白噪声驱动的线性微分方程的解来实现. 若只知道色噪声的关联函数，而不存在产生该色噪声的微分方程，则可使用本节建立的模拟方法：先对关联函数做傅里叶变换，在离散的傅里叶空间中产生一个噪声序列，再经过离散傅里叶逆变换得到所需要的色噪声序列. 由于傅里叶变换的对称性，由该方法得到的噪声关联也具有对称性，因此，对于一维时间噪声，只需选用整个序列的一半；对于二维空间噪声，仅用整个网格的 1/4.

(2) 利用离散傅里叶变换方法产生色噪声，其优点是能够模拟具有任意关联形式的色噪声，而不需要寻找由白噪声产生该色噪声的朗之万方程. 由该方法得到的噪声序列的关联与理论值相符. 为了减小噪声模拟结果与理论值之间的误差，应选取较小的网格间距和较大的网格数量. 该方法还能用于模拟空间随机关联势，这为固体表面扩散等问题提供了切实可行的研究途径.

(3) 本算法用快速傅里叶变换方法生成任意时间和空间关联的色噪声，因此它可称之为一个“噪声发生器”.

12.2 广义朗之万方程的数值模拟

12.2.1 非欧姆摩擦情况

非马尔可夫布朗动力学是指一个粒子在内部色噪声驱动下并受到记忆阻尼的作用，在一个势场中运动，可用广义朗之万方程来描述. 如果不考究噪声和阻尼的微观起源，那么噪声谱密度的知识就足以使人们将模型搞清楚. 一个非常一般的色噪声的谱密度函数，是在低频区正比于 $\omega^{\delta-1}$，这里 $0<\delta<1$ 或 $1<\delta<2$，而频率有关的阻尼核函数由涨落耗散定理以及噪声关联函数得到，称为非欧姆阻尼. 噪声的低频行为决定了自由粒子的长时结果，当 $0<\delta<1$，粒子显示欠扩散；当 $1<\delta<2$，显示超扩散，$\delta=1$ 是正常扩散.

在含非欧姆记忆阻尼的广义朗之万模型中，色噪声的谱密度函数如下

$$S(\omega)=2k_{\mathrm{B}}T\eta_\delta\left(\frac{\omega}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\mathrm{c}}\left(\frac{|\omega|}{\omega_{\mathrm{c}}}\right),\tag{12.9}$$

$f_{\mathrm{c}}(|\omega|/\omega_{\mathrm{c}})$ 是一个宽度为 ω_{c} 的高频截断函数，$\tilde{\omega}$ 代表参考频率，使得 $\eta_\delta=m\gamma_\delta$ 对任何 δ 都具有阻尼的量纲. 用 Wiener-Khinchin 定理，可以给出噪声关联函数

$$\langle\varepsilon(t)\varepsilon(t')\rangle=2k_{\mathrm{B}}T\eta_\delta\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left(\frac{|\omega|}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\mathrm{c}}\left(\frac{|\omega|}{\omega_{\mathrm{c}}}\right)\cos\omega(t-t').\tag{12.10}$$

以广义朗之万方程为模型，研究处于非欧姆阻尼环境中的系统的动力学，利用拉普拉斯变换方法求出自由粒子方均位移长时极限的精确解，发现粒子表现出反常扩散行为. 众所周知，系统的动力学行为强烈地依赖于记忆阻尼核函数的性质. 然而，由于数值求解分数阶福克尔–普朗克方程 (扩散项中将分布函数的二阶空间偏导数换成分数阶偏导) 和分数阶朗之万方程 (阻尼项中的速度换成对位移的分数阶导数) 非常困难，迄今为止，很少有工作探讨外势场中的反常输运问题.

人们过去已提出了一些数值求解广义朗之万方程的算法，大多是通过引入辅助变量将其变换成马尔可夫朗之万方程，即消去积分项 (记忆阻尼). 这样做的前提是内部色噪声能够通过白噪声驱动一个线性随机微分方程来产生，如 Ornstein-Uhlenbeck 噪声和简谐噪声. 然而，对于很多随机动力学问题，如反常扩散问题，需要产生具有更加复杂关联的色噪声，而它们一般不能由前述方法产生，所以应该发展一种有效的数值求解含任意关联色噪声的广义朗之万方程的算法.

12.2.2 利用傅里叶变换产生任意关联色噪声的数值算法

为了方便进行数值模拟，将一元二阶的广义朗之万方程 (GLE) 改写成等价的二元一阶方程组的形式

$$\begin{aligned}\dot{x}&=v(t),\\ \dot{v}(t)&=-\int_0^t\gamma(t-t')v(t')\mathrm{d}t'-\frac{U'(x(t))}{m}+\sqrt{\frac{k_\mathrm{B}T}{m}}\xi(t),\end{aligned}\tag{12.11}$$

其中，k_B 是玻尔兹曼常量，T 为环境温度，m 是布朗粒子的质量，$\gamma(t)$ 为阻尼核函数，它与 $\xi(t)$ 之间满足涨落耗散定理：$\langle\xi(t)\xi(0)\rangle=\gamma(t)$.

如果方程 (12.11) 不能变换为一个无记忆阻尼的马尔可夫朗之万方程组，则只能利用二阶随机 Runge-Kutta 算法去解方程 (12.11) 本身，而直接求解 GLE 的关键是模拟出具有时间平移不变性的关联色噪声. 产生具有某种统计性质的噪声是随机过程中的基本问题. 上节已提出了一种模拟任意色噪声的“发生器”，即只要知道噪声时间关联的傅里叶变换，就可以得到高斯色噪声，甚至对于噪声时间关联的傅里叶变换无法被确定的情况，也可选择一个合适的截断函数，这种算法依然有效 (Lü et al., 2005).

在 $\omega-$傅里叶空间中，噪声的关联满足

$$\langle\tilde{\xi}(\omega)\tilde{\xi}(\omega')\rangle=2\pi\tilde{\gamma}(\omega)\delta(\omega+\omega'),\tag{12.12}$$

其中，$\tilde{\xi}(\omega)$ 和 $\tilde{\gamma}(\omega)$ 分别为 $\xi(t)$ 和 $\gamma(t)$ 的傅里叶变换. 有了这些素材，就可以按照以下步骤产生噪声：首先将时间分成间隔为 Δt 的 $N=2^n$ 等份，用希腊字母脚标来表示傅里叶空间中的量. 对 (12.12) 式进行离散化处理可得

$$\langle\xi(\omega_\mu)\xi(\omega_\nu)\rangle=\gamma(\omega_\mu)N\Delta t\delta_{\mu+\nu,0}.\tag{12.13}$$

进一步构造出傅里叶空间中的噪声项 $\xi(\omega_\mu)$

$$\begin{aligned}\xi(\omega_\mu)&=\sqrt{N\Delta t\gamma(\omega_\mu)}\alpha_\mu,\qquad\mu=1,\cdots,N-1,\\ \xi(\omega_0)&=\gamma(\omega_N),\end{aligned}\tag{12.14}$$

其中，α_μ 是均值为 0 的高斯随机数，其关联满足

$$\langle\alpha_\mu\alpha_\nu\rangle=\delta_{\mu,-\nu}.\tag{12.15}$$

α_μ 可以写成实部和虚部的和 $\alpha_\mu=a_\mu+\mathrm{i}b_\mu$，其中 a_μ 和 b_μ 是均值为 0 的高斯随机数，其方均差由文献 (Sancho et al, 2004) 给出

$$\begin{cases}\langle a_\mu^2\rangle=\langle b_\mu^2\rangle=\dfrac{1}{2},\qquad\mu=1,2,\cdots,N-1;\\ \langle a_\mu^2\rangle=1,\langle b_\mu^2\rangle=0,\quad\mu=N,\end{cases}$$

利用快速傅里叶变换对 (12.14) 作逆傅里叶变换，可以得到 N 个实数 $\xi(t_i)$，这就是实空间中的噪声序列. 然而，由于傅里叶变换的对称性，实际上只有其中的 $N/2$ 项是独立的，另外一半与前一半满足周期关联关系.

利用产生的噪声序列可以将广义朗之万方程中的阻尼核函数计算出来

$$\gamma(t_i)=\left\langle\frac{\sum\limits_{j=0}^{N_0}\xi(t_j+i\Delta t)\xi(t_j)}{N_0+1}\right\rangle, \tag{12.16}$$

其中，$N_0<N/2$，通常取 $N_0=N/4$. 统计平均 $\langle\cdots\rangle$ 是对所有生成的噪声进行的. 通过比较 $\gamma(t_i)$ 与 $\gamma(t)$ 的理论值可以验证产生的噪声的正确性.

12.2.3　粒子在非欧姆阻尼环境中的扩散

解析求解在非欧姆阻尼环境(5.22)中的广义朗之万方程(5.1)，自由粒子($U(x)=0$) 方均位移的长时间结果为

$$\lim_{t\to\infty}\langle\Delta x^2(t)\rangle\simeq 2\frac{k_{\rm B}T}{m}\frac{1}{\omega_\delta^2}\frac{(\omega_\delta t)^\delta}{\Gamma(\delta+1)}, \tag{12.17}$$

其中，ω_δ 定义为

$$\omega_\delta^{2-\delta}=\gamma_\delta\frac{1}{\tilde{\omega}^{\delta-1}}\frac{1}{\sin(\delta\pi/2)}. \tag{12.18}$$

此时粒子的运动不再遵守 Einsten 扩散公式，即为反常扩散.

下面建立一种数值算法模拟这种由记忆阻尼所引起的反常扩散过程. 由非欧姆谱密度 (5.22) 式可以给出谱空间中噪声的关联函数

$$\gamma(\omega)=2\gamma_\delta\left(\frac{|\omega|}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}f_{\rm c}\left(\frac{|\omega|}{\omega_{\rm c}}\right), \tag{12.19}$$

选择光滑的截断函数

$$f_{\rm c}\left(\frac{|\omega|}{\omega_c}\right)=\exp\left(-\frac{\omega}{\omega_{\rm c}}\right).$$

由于系统的长时行为由噪声的低频部分决定，因此高频截断函数的形式对结果的影响不大. 将 $\xi(\omega)$ 离散化

$$\xi(\omega_\mu)=\begin{cases}\sqrt{2N\Delta t\gamma_\delta\left(\dfrac{\theta\omega_{\rm c}}{\tilde{\omega}}\right)^{\delta-1}\exp(\theta)}\cdot\alpha_\mu, & 1\leqslant\mu\leqslant\dfrac{N}{2};\\ \xi(\omega_{N-\mu}), & \dfrac{N}{2}\leqslant\mu\leqslant N.\end{cases} \tag{12.20}$$

其中，$\theta=2\pi\mu/(N\Delta t\omega_{\rm c})$. 利用快速傅里叶变换 (FFT) 程序即可求出实空间中的噪声序列.

由实空间中的噪声序列，利用 (12.16) 式可以求出其关联函数. 将 (12.19) 式离散化，并利用 FFT 程序对其实施逆傅里叶变换，可求出噪声的时间关联函数. 参

数取值如下：$\tilde{\omega}=1.0$，$\gamma_\delta=1.0$，$\omega_{\rm c}=4.0$，$\Delta t=0.01$，$N=2^{25}$. 图 5.1 分别比较了 $\delta=0.5$ 和 $\delta=1.5$ 两种情况下，噪声时间关联函数的理论值和模拟值，其中实线和空心圆圈分别为理论和数值结果. 可以看到两者符合的非常好，这说明利用第 12.2.2 节中提出的算法模拟获得的噪声是成功的.

由前面得到的实空间中的噪声序列，用二阶随机 Runge-Kutta 算法模拟 GLE. 令粒子从坐标原点出发，其初始速度满足高斯分布，二次矩为：$\{v^2(0)\}=\dfrac{k_{\rm B}T}{m}$，其中 $\{\cdots\}$ 表示对粒子初始值求平均. 图 5.2 用空心三角分别画出了 $\delta=0.5$、0.7 和 $\delta=1.3$、1.5 四种情况下自由粒子的方均位移随时间演化的模拟结果. 由 (12.17) 式可以计算出不同的 δ 情况下，粒子方均位移长时极限下的渐近表达式. 为了将数值与理论进行比较，我们在图 5.2 中还用实线画出了表 12.1 中列出的渐近解. 从中可见：数值模拟结果与理论值符合得非常好.

表 12.1　自由粒子在不同 δ 的非欧姆环境中方均位移随时间演化的渐近结果

δ	T	$\Gamma(\delta+1)$	$\lim_{t\to\infty}\langle x^2(t)\rangle$
0.5	3.0	0.886	$4.788t^{0.5}$
0.7	3.0	0.909	$5.884t^{0.7}$
1.3	1.0	1.167	$1.527t^{1.3}$
1.5	1.0	1.329	$1.064t^{1.5}$

12.3　随机关联势

第 12.2 节的方法也可以用来产生空间噪声，即随机关联势 (Make et al., 1996; Sancho et al., 2004). 现考虑二维情况，二维变量的傅里叶变换和逆变换的形式为

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{k})&=\int_{-\infty}^{\infty}f(\boldsymbol{r})\exp(-{\rm i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}){\rm d}\boldsymbol{r},\\ f(\boldsymbol{r})&=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty}f(\boldsymbol{k})\exp({\rm i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}){\rm d}\boldsymbol{k}.\end{aligned}\tag{12.21}$$

在格点数为 $N\times N$、间距是 Δx 的二维网格内，噪声的离散傅里叶变换和逆变换的形式为

$$\begin{aligned}\eta_{\mu,\nu}&=\Delta x^2\sum_{m,n=0}^{N-1}\eta_{m,n}\exp\left[-{\rm i}\frac{2\pi}{N}(m\mu+n\nu)\right],\quad \mu,\nu=0,1,\cdots,N-1\ ,\\ \eta_{m,n}&=\frac{1}{(N\Delta x)^2}\sum_{\mu,\nu=0}^{N-1}\eta_{\mu,\nu}\ \exp\left[{\rm i}\frac{2\pi}{N}(m\mu+n\nu)\right],\quad m,n=0,1,\cdots,N-1\ .\end{aligned}\tag{12.22}$$

若随机关联势的关联函数为 $\langle\eta(\boldsymbol{r})\eta(\boldsymbol{r}')\rangle = g(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)$，则傅里叶空间中的关联函数是

$$\langle\eta(\boldsymbol{k})\eta(\boldsymbol{k}')\rangle = (2\pi)^2 g(\boldsymbol{k})\delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'), \tag{12.23}$$

$g(\boldsymbol{k})$ 是 $g(\boldsymbol{r})$ 的傅里叶变换. (12.23) 式的离散形式为

$$\langle\, \eta_{\mu,\nu}\, \eta_{\mu',\nu'}\rangle = (N\Delta x)^2 g_{\mu,\nu}\, \delta_{\mu,N-\mu'}\, \delta_{\nu,N-\nu'}, \tag{12.24}$$

其中，$g_{\mu,\nu}$ 是 $g(\boldsymbol{k})$ 的离散形式，并且具有对称性：$g_{\mu,\nu} = g_{N-\mu,\nu} = g_{\mu,N-\nu} = g_{N-\mu,N-\nu}$.

由 (12.24) 式的关联形式，可以在离散傅里叶空间中产生噪声：

$$\eta_{\mu,\nu} = N\Delta x\sqrt{g_{\mu,\nu}}\ \alpha_{\mu,\nu}, \tag{12.25}$$

其中，$\alpha_{\mu,\nu}$ 是平均值为零的高斯分布随机数 (复数). 为了使噪声 $\eta_{\mu,\nu}$ 具有 (12.24) 式的关联形式，$\alpha_{\mu,\nu}$ 必须满足 $\langle\, \alpha_{\mu,\nu}\, \alpha_{\mu',\nu'}\rangle = \delta_{\mu,N-\mu'}\, \delta_{\nu,N-\nu'}$.

为此，可以用如下方法实现这种关联

$$\begin{aligned}
\alpha_{0,0} &= a_{0,0}, \quad \alpha_{\frac{N}{2},\frac{N}{2}} = a_{\frac{N}{2},\frac{N}{2}},\\
\alpha_{\frac{N}{2},0} &= b_{\frac{N}{2},0}, \quad \alpha_{0,\frac{N}{2}} = b_{0,\frac{N}{2}},\\
\alpha_{\mu,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,0}+\mathrm{i}b_{\mu,0}), \quad \alpha_{N-\mu,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,0}-\mathrm{i}b_{\mu,0}),\\
\alpha_{0,\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{0,\nu}+\mathrm{i}b_{0,\nu}), \quad \alpha_{0,N-\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{0,\nu}-\mathrm{i}b_{0,\nu}),\\
\alpha_{\mu,\frac{N}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,\frac{N}{2}}+\mathrm{i}b_{\mu,\frac{N}{2}}), \quad \alpha_{N-\mu,\frac{N}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,\frac{N}{2}}-\mathrm{i}b_{\mu,\frac{N}{2}}),\\
\alpha_{\frac{N}{2},\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\frac{N}{2},\nu}+\mathrm{i}b_{\frac{N}{2},\nu}), \quad \alpha_{\frac{N}{2},N-\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\frac{N}{2},\nu}-\mathrm{i}b_{\frac{N}{2},\nu}),\\
\alpha_{\mu,\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,\nu}+\mathrm{i}b_{\mu,\nu}), \quad \alpha_{N-\mu,N-\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,\nu}-\mathrm{i}b_{\mu,\nu}),\\
\alpha_{\mu,N-\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,N-\nu}+\mathrm{i}b_{\mu,N-\nu}), \quad \alpha_{N-\mu,\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{\mu,N-\nu}-\mathrm{i}b_{\mu,N-\nu}),
\end{aligned}$$

其中，$a_{\mu,\nu}$、$b_{\mu,\nu}$ 是相互独立的、平均值为零、方差为 1 的高斯随机数 (实数). 要产生 $N\times N$ 个噪声样本，需要 $N\times N$ 个独立的高斯随机数.

最后对 $\eta_{\mu,\nu}$ 做逆变换即可得到实空间的随机关联势. 由于离散傅里叶变换的对称性，用这种方法产生的空间噪声的关联也具有对称性，所以可用的空间噪声样本只占总数的 1/4.

模拟粒子在随机关联势中的运动，需要计算粒子受到的势场力的冲量. 若选取较小的时间步长，使粒子在一个时间步长内的位移远小于随机势的关联长度，受到的势场力 $\boldsymbol{F}[\boldsymbol{x}(t)]$ 在一个时间步长内的变化不大，则可以近似用 $\boldsymbol{F}[\boldsymbol{x}(t)]\Delta t$ 模拟势

场力的冲量. 而计算 $\boldsymbol{F}[\boldsymbol{x}(t)]$ 的数值方案是，先由随机势的模拟结果计算出网格点上的势场力，然后进行插值.

应用上述方法，在格点数为 $N\times N$、网格间距为 $\Delta x=1$ 的网格中模拟二维的短程关联随机势，关联函数取作

$$g(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)=\langle\eta(\boldsymbol{r})\eta(\boldsymbol{r}')\rangle=g_0\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}{2\lambda^2}\right). \tag{12.26}$$

由图 12.2 可以看出，与 Δx 相比，关联长度 λ 越大，模拟结果的误差较大，为了减小误差，应尽量使 $\Delta x\ll\lambda$ 且 $N\Delta x\gg\lambda$.

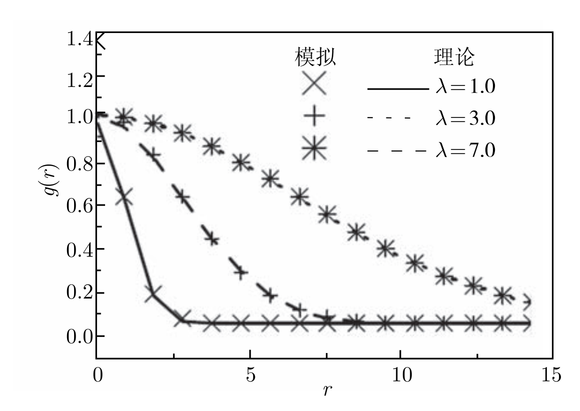


图 12.2　二维短程关联随机势模拟结果与理论值的比较

不同的点和线分别是数值结果和理论值. 所用的格点数为 $N=2^{13}$，格点间隔 $\Delta x=1$，$g_0=1.0$

12.4　分数阶导数和分数阶微分方程的数值算法

分数阶导数　利用分数阶导数的 Grunwald-Letnikov 定义, 其数值算法为

$${}_0D_t^\alpha f(t)=\lim_{h\to 0}\frac{{}_a\mathrm{e}_h^\alpha f(t)}{h^\alpha},\quad {}_a\mathrm{e}_h^\alpha f(t)=\sum_{j=0}^{\left[\frac{t-a}{h}\right]}(-1)^j\begin{pmatrix}\alpha\\ j\end{pmatrix}f(t-jh), \tag{12.27}$$

式中，$[x]$ 表示 x 的整数部分.

分数阶微分方程　考虑一个分数阶微分方程的初始值问题:

$$\begin{aligned}&{}_0D_t^\alpha y(t)+Ay(t)=f(t)\quad (t>0),\\ &y^{(k)}(0)=0\quad (k=1,\cdots,n-1),\end{aligned} \tag{12.28}$$

这里 $n-1<\alpha\leqslant n$. 对于 $0<\alpha\leqslant 2$ 情况，这一方程称为弛豫振荡方程.

方程 (12.28) 的一级近似是

$$h^{-\alpha}\sum_{j=1}^{m} w_j^{(\alpha)} y_{m-j} + Ay_m = f_m, \quad (m = 1, 2, \cdots); \quad y_0 = 0, \tag{12.29}$$

在这个近似下，数值解算法如下:

$$\begin{aligned} &y_k = 0 \quad (k = 1, 2, \cdots, n-1), \\ &y_m = -Ah^{\alpha} y_{m-1} - \sum_{j=1}^{m} w_j^{(\alpha)} y_{m-j} + h^{\alpha} f_m \quad (m = n, n+1, \cdots), \end{aligned} \tag{12.30}$$

其中，$t_m = mh$, $y_m = y(t_m)$,$f_m = f(t_m)$, 而系数 $w_j^{(\alpha)}$ 定义为

$$w_j^{(\alpha)} = (-1)^j \begin{pmatrix} \alpha \\ j \end{pmatrix} \quad (j = 0, 1, 2, \cdots), \tag{12.31}$$

它的迭代算法如下:

$$w_0^{(\alpha)} = 1; \quad w_j^{(\alpha)} = \left(1 - \frac{\alpha + 1}{j}\right) w_k^{(\alpha)} - 1 \quad (j = 1, 2, 3, \cdots). \tag{12.32}$$

12.5 连续时间无规行走的蒙特卡罗模拟

12.5.1 CTRW 模型及其数值实现

1. CTRW 基本思想

CTRW 模型能够给出反常扩散系统的稳定态分布，其有两个基本要素：跳跃步长分布的二次矩和两次跳跃之间等待时间分布的一次矩，分别由跳跃步长分布函数 $\lambda(x)$ 和等待时间分布函数 $\psi(\tau)$ 来确定. 其物理意义分别是：$\lambda(x)$ 表示跳跃步长为 x 的概率密度；$\psi(\tau)$ 表示一次等待时间为 τ 的概率密度. CTRW 理论是以平均等待时间 $T = \int_0^{\infty} \tau\psi(\tau)\mathrm{d}\tau$ 和跳跃步长的二次距 $\sum^2 = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\lambda(x)\mathrm{d}x$ 是否有限，来对扩散行为进行分类的. 对于正常扩散，两者都是确定的；对于反常扩散，两者之一是发散的：平均等待时间发散而跳跃距二次矩有限为欠 (慢) 扩散；反之为超 (快) 扩散.

2. 数值模拟连续时间无规行走

1) 欠扩散 $(0 < \alpha < 1)$

在 $0 < \alpha < 1$ 情况下，经过足够长的时间之后，系统的行为由等待时间分布函数 $\psi(\tau)$ 的渐进行为决定，这里选择的等待时间分布密度函数为 Mittag-Leffler 函数

$$\psi(\tau) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} E_\alpha[-(v\tau)^\alpha], \tag{12.33}$$

其中，$E_\alpha[-(v\tau)^\alpha]$ 称为 Mittag-Leffler 函数，有

$$E_\alpha[-(v\tau)^\alpha] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-(v\tau)^\alpha]^n}{\Gamma(n\alpha+1)}, \tag{12.34}$$

无势条件下 v 为一常量.

在数值计算中，从 Mittag-Leffler 时间分布密度函数中抽取等待时间 τ 序列是非常麻烦的，在 $\alpha < 0.9$ 的情况下，可以用 Pareto 分布密度函数来近似 (林方等, 2008)，其定义为

$$\psi(\tau) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} P_\alpha(v\tau), \tag{12.35}$$

其中，

$$P_\alpha(v\tau) = \frac{1}{[1+\Gamma(1-\alpha)^{1/\alpha} v\tau]^\alpha}. \tag{12.36}$$

等待时间 τ 的子样 $\{T_i\}$ 由下式抽出，

$$T_i = v^{-1} \frac{\xi^{-1/\alpha} - 1}{\Gamma^{1/\alpha}(1-\alpha)}, \tag{12.37}$$

其中，ξ 是 $[0,1]$ 区间均匀分布随机数.

同时，选择高斯函数

$$\lambda(x) = (4\pi\sigma^2)^{-1/2} \exp(-x^2/4\sigma^2), \tag{12.38}$$

作为跳跃步长 x 的分布密度函数.

2) 正常扩散 $(\alpha = 1)$

粒子的跳跃步长分布的二次距和等待时间分布的一次距都是有限的. 可考虑 Poisson 分布：

$$\psi(\tau) = \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{\tau}{T}\right), \tag{12.39}$$

为粒子下一次跳跃前的等待时间分布；高斯分布 (12.38) 式作为粒子每次向前或者向后的跳跃步长分布，得到自由粒子长时间后的方均位移：

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt, \tag{12.40}$$

这就是著名的爱因斯坦公式. 事实上，在早期爱因斯坦的一维无规行走理论中，并没有考虑两次跳跃间的等待时间分布，而这里引入了一个有限平均等待时间分布. 在布朗运动的朗之万理论中，只要粒子阻尼核函数的 Laplace 变换在低频情况下与频率无关，则粒子在无势情况下显示正常扩散，当然这是一个理想化的模型.

3) 超扩散 $(1 < \alpha < 2)$

在 CTRW 模型中，超扩散要求平均等待时间 T 确定，而跳跃步长的二次矩 $\sum^2$ 发散. 可以选择莱维分布作为跳跃步长的分布函数，其分布的渐进形式为

$$\lambda(x) = \sigma^{-\mu} \frac{\Gamma(1+\mu)\sin(\pi\mu/2)}{\pi|x|^{1+\mu}}, \quad \mu = \frac{2}{\alpha}. \tag{12.41}$$

利用下面的方法分两个步骤来得到所需的跳跃步长 x 的子样 $\{x_i\}$.

(1) 产生辅助随机数序列 $\{\xi_i\}$，其分布密度函数具有与 (12.41) 式相同的指数渐进形式，作为蒙特卡罗抽样时方便得到反函数 F^{-1} 的解析表达式，令

$$F(\xi) = \begin{cases} \dfrac{1}{2(1+|\xi|^{\mu})}, & \xi < 0; \\ 1 - \dfrac{1}{2(1+|\xi|^{\mu})}, & \xi \geqslant 0. \end{cases} \tag{12.42}$$

(2) 将随机数序列 $\{\xi_i\}$ 作如下处理，就得出了所需的 $\{x_i\}$

$$X_i = \frac{1}{a}\sum_{j=1}^{M} \xi_j, \tag{12.43}$$

其中，$a = \{\pi/[2\Gamma(\mu)\sin(\mu\pi/2)]\}^{1/\mu}$.

同时，选择 (12.39) 式的 Poisson 分布作为等待时间 τ 的分布密度函数.

在这种情况下，自由粒子的方均位移 $\langle x^2(t)\rangle$ 发散，应对莱维分布实施有限宽度的限制修正，即

$$\langle x^2(t)\rangle_L \sim \int_{-L_1 t^{1/\mu}}^{L_2 t^{1/\mu}} x^2 W(x,t)\mathrm{d}x \sim t^{\alpha}, \tag{12.44}$$

式中，$W(x,t)$ 为粒子的分布密度函数. 这实质上是一个边界为 $(-L_1 t^{1/\mu}, L_2 t^{1/\mu})$ 的随时间增长的“盒子”. 在作系综平均求 $\langle x^2(t)\rangle$ 时，只有处于这个盒子中的粒子才参与平均，舍弃了落在盒子以外的粒子. L_1 和 L_2 的取值应该满足：对于任意 $\alpha \in (1,2)$，确保参与平均的粒子坐标 x 满足分布

$$W(x,t) \sim \frac{Dt}{|x|^{1+\mu}}. \tag{12.45}$$

以上可作为莱维噪声的产生方案. 下面，我们给出一个数值模拟白 Lévy 噪声驱动的朗之万方程的简单算法.

$$\dot{x} = v, \quad \dot{v} = -\gamma v + \frac{f(x)}{m} + \frac{\xi(t)}{m}, \tag{12.46}$$

其中，$f(x) = -U'(x)$，γ 是阻尼系数，$\xi(t)$ 是零平均白莱维噪声，它由傅里叶空间的特性函数所定义

$$p(k)=\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\mathrm{i}k\xi)p(\xi)\mathrm{d}\xi=\exp(-D|k|^{\mu}). \tag{12.47}$$

方程 (12.46) 的欧拉模拟方法为

$$\begin{aligned}x(t+\Delta t)&=x(t)+v(t)\Delta t,\\ v(t+\Delta t)&=v(t)-\gamma v(t)\Delta t+\frac{f(x)}{m}\Delta t+\frac{(D\Delta t)^{1/\mu}}{m}\xi_{\mu},\end{aligned} \tag{12.48}$$

这里，用文献 (Lü et al., 2011) 的方法产生对称的 μ 稳定莱维随机数

$$\xi_{\mu}=\left\{\frac{-\ln(u\cos\phi)}{\cos[(1-\mu)\phi]}\right\}^{(1-1/\mu)}\frac{\sin(\mu\phi)}{\cos\phi}, \tag{12.49}$$

其中，$\phi=\pi(\nu-1/2)$，u 和 ν 是两个独立的 $[0,1]$ 区间的均匀分布随机数.

从图 12.3~ 图 12.5 可以看出，数值模拟的结果与理论值符合得很好. 这表明上述对等待时间 τ 和跳跃步长 x 随机序列的抽样方法是合理可行的，这种方法还可以将 CTRW 应用于束缚势或周期势场情况.

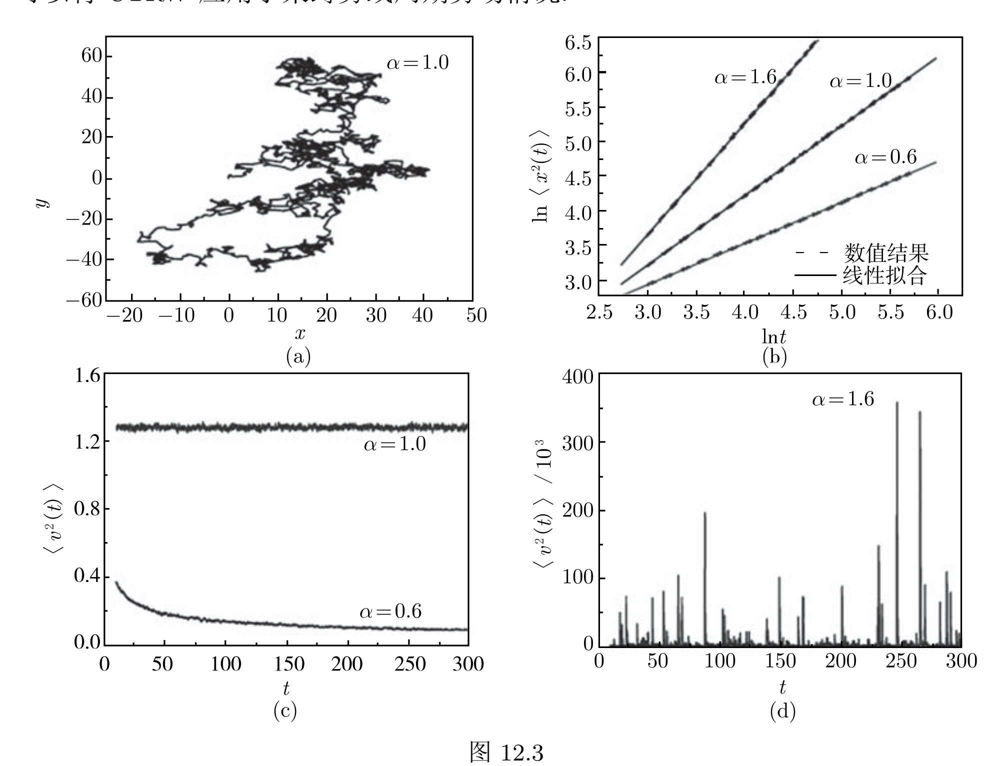


图 12.3

(a) 用环境依赖的 CTRW 模型得到的二维粒子轨迹；(b) 几种 α 指数的自由粒子的 $\ln\langle x^2(t)\rangle\sim\ln t$ 曲线；(c) 正常扩散 ($\alpha=1.0$) 和欠扩散 ($\alpha=0.6$) 情况下，自由粒子的方均速度 $\langle v^2(t)\rangle$ 随时间的变化；(d) 超扩散 ($\alpha=1.6$) 情况下，自由粒子的方均速度随时间的变化

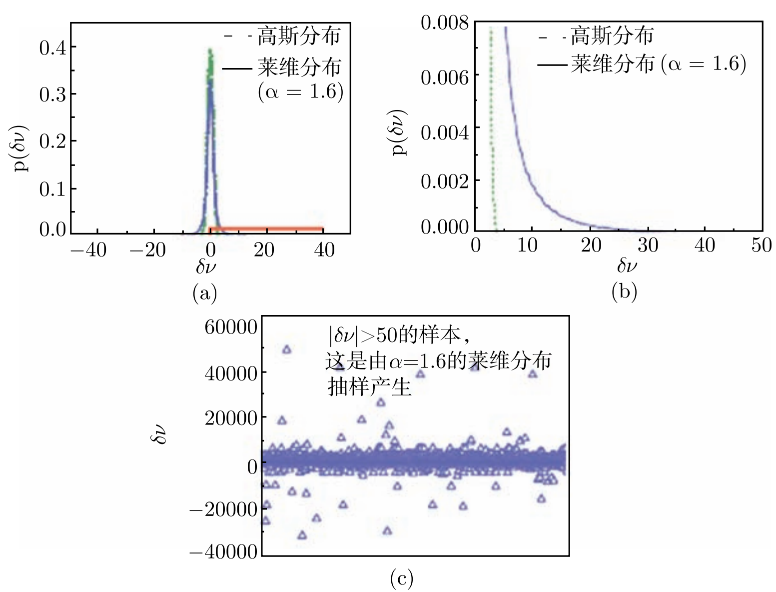


图 12.4　高斯分布和莱维分布尾部特征的比较；从莱维分布抽取的绝对值大于 50.0 的脉冲速度样本，这些样本中占总样本的 0.401%. 这里，$\alpha = 1.6$，样本总数为 1×10^7

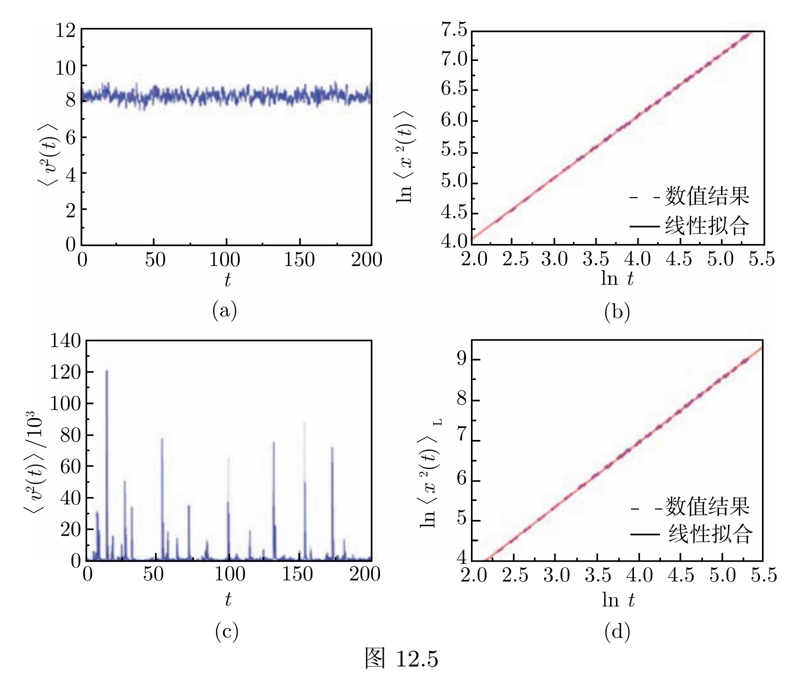


图 12.5

(a) 舍弃了绝对值大于 50.0 的脉冲速度样本的自由粒子的方均速度；(b) 在图 (a) 情况下，自由粒子的扩散指数 $\alpha \simeq 1$；(c) 包含了所有脉冲速度样本的自由粒子的方均速度；(d) 在图 (c) 情况下，自由粒子的扩散指数 $\alpha \simeq 1.6$. 本图所有的脉冲速度样本均是从 $\alpha = 1.6$ 的莱维分布中抽取，参数为 $\tau_0 = 0.5$，$\gamma = 2.0$

12.5.2　有势情况下的 CTRW

用 CTRW 模拟粒子在不对称周期势的扩散过程，由于势的存在，粒子的跳跃有两种情况：一是从势能较高的位置跳跃到势能较低的位置，从能量变化的角度看这样的跳跃总是以概率 1 完成的；二是从势能较低的位置跳跃到势能较高的位置，这样的跳跃则是以一定概率来实现的. 现采用 Metropolis 方法，来判断能否实现从势能较低的位置到势能较高的位置的跳跃.

若粒子从 x_i 跳跃到 $x'_{i+1} = x_i + \Delta x$，势能差 $\Delta U \leqslant 0$，本次跳跃总是可以实现的吗？按通常 Metropolis 方法作判断：是的，其实不然！如果粒子从 x_i 跳跃到 x'_{i+1} 的过程中翻越了势垒，那么粒子的此次跳跃实际包含两个阶段：从 x_i 到势垒处 x_0，以一定的概率实现，即产生一个 $[0,1]$ 均匀分布随机数 ξ，若

$$\xi \leqslant \exp(-\beta\Delta U), \tag{12.50}$$

则粒子越过该势垒的事件得以发生；从势垒处 x_0 到 x'_{i+1}，势能降低，这个分过程以概率 1 接受. 根据以上的分析，对运用 Metropolis 方法判断粒子能否实现某次跳跃的方法作了改进，使之更加贴近真实的物理情形：在计算 ΔU 之前，首先判断粒子是否翻越势垒，若粒子翻越了势垒，则

$$\Delta U = U(x_0) - U(x_i); \tag{12.51}$$

若粒子没有翻越势垒，则

$$\Delta U = U(x'_{i+1}) - U(x_i). \tag{12.52}$$

之后再用通常的 Metropolis 方法判定方案.

附录A　Mittag-Leffler 函数

A.1　单参数 Mittag-Leffler 函数

Mittag-Leffler 函数是指数函数的自然推广. 它是 Fox 函数的一种特殊情况, 通过以下的逆拉普拉斯变换来定义:

$$E_\alpha[-(t/\tau)^\alpha] = L^{-1}\left(\frac{1}{u+\tau^{-\alpha}u^{1-\alpha}}\right), \tag{A.1}$$

以此能推论出它可以表示成级数和的形式

$$E_\alpha[-(t/\tau)^\alpha] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{[-(t/\tau)^\alpha]^n}{\Gamma(1+\alpha n)}, \tag{A.2}$$

对于 $t \gg \tau$ 和 $0 < \alpha < 1$, 它的渐进行为是

$$E_\alpha[-(t/\tau)^\alpha] \sim \frac{(t/\tau)^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)}. \tag{A.3}$$

Mittag-Leffler 函数的特殊情况是指数函数

$$E_1(-t/\tau) = \mathrm{e}^{-t/\tau}, \tag{A.4}$$

以及指数和余误差函数的乘积

$$E_{1/2}[-(t/\tau)^{1/2}] = \mathrm{e}^{t/\tau}\mathrm{erf}[(t/\tau)^{1/2}]. \tag{A.5}$$

注意 Mittag-Leffler 函数为分数阶弛豫方程的解

$$\frac{\mathrm{d}\varPhi(t)}{\mathrm{d}t} = -\tau^\alpha\ {}_0D_t^{1-\alpha}\varPhi(t). \tag{A.6}$$

这一函数还是初始一段时间的指数函数

$$E_\alpha[-(t/\tau)^\alpha] \sim \exp\left[-\frac{(t/\tau)^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)}\right] \tag{A.7}$$

和长时间幂律行为的内插.

A.2 两参数 Mittag-Leffler 函数

$$E_{\alpha,\beta}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{z^k}{\Gamma(\alpha k+\beta)}\quad(\alpha>0,\ \beta>0),\tag{A.8}$$

$$\begin{gathered}E_{1,1}(z)=\mathrm{e}^z,\quad E_{1,2}(z)=\frac{\mathrm{e}^z-1}{z},\\ E_{2,1}(z)=\cosh(\sqrt{z}),\quad E_{2,2}(z)=\frac{\sinh(\sqrt{z})}{\sqrt{z}},\\ E_{1/2,1}(\sqrt{z})=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^z\mathrm{erf}(-\sqrt{z}).\end{gathered}\tag{A.9}$$

若 $\beta=1$，则以上退化为单参数 Mittag-Leffler 函数.

分数阶正弦和余弦函数定义为

$$Sc_\alpha(z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n z^{(2-\alpha)n+1}}{\Gamma[(2-\alpha)n+2]}=zE_{2-\alpha,2}(-z^{2-\alpha}),\tag{A.10}$$

$$Cs_\alpha(z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n z^{(2-\alpha)n+1}}{\Gamma[(2-\alpha)n+1]}=zE_{2-\alpha,1}(-z^{2-\alpha}).\tag{A.11}$$

A.3 Mittag-Leffler 函数的拉普拉斯变换

指数函数是 Mittag-Leffler 函数的一个特殊情况，我们查看 e^z 和 Mittag-Leffler 函数的关系. 首先，以一个非传统的方式给出函数 $t^k\mathrm{e}^{at}$ 的拉普拉斯变换

$$\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-t}\mathrm{e}^{\pm zt}\mathrm{d}t=\frac{1}{1\mp z}\quad(|z|<1),\tag{A.12}$$

用 e^z 的级数展开，则有

$$\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-t}\mathrm{e}^{zt}\mathrm{d}t=\frac{1}{1-z}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\pm z)^k}{k!}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-t}t^k\mathrm{d}t=\sum_{k=0}^{\infty}(\pm z)^k=\frac{1}{1\mp z}.\tag{A.13}$$

然后，我们对以上等式两边求 z 微分，结果是

$$\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-t}t^k\mathrm{e}^{\pm zt}\mathrm{d}t=\frac{k!}{(1\mp z)^{k+1}}\quad(|z|<1),\tag{A.14}$$

$$\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-pt}t^k\mathrm{e}^{\pm at}\mathrm{d}t=\frac{k!}{(p\mp a)^{k+1}}\quad(\mathrm{Re}(p)>|a|).\tag{A.15}$$

现在让我们考虑 Mittag-Leffler 函数，将之代入到积分中导致

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} t^{\beta-1} E_{\alpha,\beta}(zt^\alpha)\mathrm{d}t = \frac{1}{1-z} \quad (|z|<1), \tag{A.16}$$

得函数 $t^{\alpha k+\beta-1}E_{\alpha,\beta}^{(k)}(\pm zt^\alpha)$ 的一对拉普拉斯变换：

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-pt} t^k \mathrm{e}^{\pm at}\mathrm{d}t = \frac{k!}{(p\mp a)^{k+1}} \quad (\mathrm{Re}(p)>|a|), \tag{A.17}$$

上式的 $\alpha=\beta=\dfrac{1}{2}$ 的特殊情况为

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-pt} t^{\frac{k-1}{2}} E_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(k)}(\pm a\sqrt{t})\mathrm{d}t = \frac{k!}{(\sqrt{p}\mp a)^{k+1}} \quad (\mathrm{Re}(p)>a^2), \tag{A.18}$$

其在求解半阶微分方程时非常有用.

A.4 Mittag-Leffler 函数的分数阶导数

对 Mittag-Leffler 函数实施分数阶微分 ${}_0D_t^\gamma$ (γ 是一个任意实数)，有

$${}_0D_t^\gamma[t^{\alpha k+\beta-1}E_{\alpha,\beta}^{(k)}(\lambda t^\alpha)] = t^{\alpha k+\beta-\gamma-1}E_{\alpha,\beta-\gamma}^{(k)}(\lambda t^\alpha), \tag{A.19}$$

依赖于一个参数的积分的分数阶导数

$${}_0D_t^\alpha \int_0^t K(t,\tau)\mathrm{d}\tau = \int_0^t {}_\tau D_t^\alpha K(t,\tau)\mathrm{d}\tau + \lim_{\tau\to t-0} {}_\tau D_t^{\alpha-1}K(t,\tau) \quad (0<\alpha<1), \tag{A.20}$$

$${}_0D_t^\alpha \int_0^t K(t-\tau)f(\tau)\mathrm{d}\tau = \int_0^t {}_0D_\tau^\alpha K(\tau)f(t-\tau)\mathrm{d}\tau + \lim_{\tau\to+0} f(t-\tau){}_0D_\tau^{\alpha-1}K(\tau). \tag{A.21}$$

A.5 Wright 函数

Wright 函数定义为

$$W(z;\alpha,\beta) = \sum_{k=0}^\infty \frac{z^k}{k!\Gamma(\alpha k+\beta)}, \tag{A.22}$$

其积分表述是

$$W(z;\alpha,\beta) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{Ha} u^{-\beta}\mathrm{e}^{u+zu^{-\alpha}}\mathrm{d}u, \tag{A.23}$$

式中，Ha 代表 Hankel 环路. 根据 Wright 函数的级数和定义，其具有如下的性质：

$$W(z;0,1)=\mathrm{e}^z; \tag{A.24}$$

$$W(-z;-\alpha,1-\alpha)=M(z;\alpha)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k z^k}{k!\Gamma(-\alpha(k+1)+1)}; \tag{A.25}$$

$$W\left(-z;-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right)=M\left(z;\frac{1}{2}\right)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\exp\left(-\frac{z^2}{4}\right). \tag{A.26}$$

这可以看出 Wright 函数是指数函数的一种推广，这个函数在线性偏分数阶微分方程的解中发挥重要作用.

附录B　Fox $\boldsymbol{H}$ 函数

Fox 函数，也被称为 Fox H 函数、$H-$函数、广义 Mellin-Barnes 函数或者广义 Meijer G$-$函数. 在它被作为一个 x 空间莱维分布的解析表示引入到物理以前，就已被应用在统计中. Fox 函数的重要性还在于应用数学和统计的几乎所有的特殊函数都是它的特殊情况. 计算非常复杂的函数，像 Wright 广义贝赛尔函数、Meijer 的 G$-$函数或者 Maitland 广义超几何函数都包含在 Fox 函数之中.

在 1961 年，Fox 在他的对称傅里叶核作为 Mellin-Barnes 型路径积分的研究中，定义了 H 函数:

$$\begin{aligned} H_{pq}^{mn}(z) &= H_{pq}^{mn}\left[z\left|\begin{matrix}(a_1,A_1),(a_2,A_2),\cdots,(a_p,A_p)\\(b_1,B_1),(b_2,B_2),\cdots,(b_q,B_q)\end{matrix}\right.\right] \\ &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}}\int_L \mathrm{d}s\chi(s)z^s, \end{aligned} \tag{B.1}$$

其中，积分密度：

$$\chi(s) = \frac{\prod_{j=1}^{m}\Gamma(b_j - B_j s)\prod_{j=1}^{n}\Gamma(1-a_j+A_j s)}{\prod_{j=m+1}^{q}\Gamma(1-b_j+B_j s)\prod_{j=n+1}^{p}\Gamma(a_j-A_j s)}. \tag{B.2}$$

注意在方程 (B.1)，路径积分表示 $\chi(s)$ 的逆 Mellin 变换.

由于方程 (B.2) 所定义的积分核 $\chi(s)$ 的结构，Fox 函数满足几个方便的性质，其中的三个如下：

(1)

$$H_{pq}^{mn}\left[x\Big|^{(a_p,A_p)}_{(b_q,B_q)}\right] = kH_{pq}^{mn}\left[x\Big|^{(a_p,kA_p)}_{(b_q,kB_q)}\right] \tag{B.3}$$

(2)

$$x^{\sigma}H_{pq}^{mn}\left[x\left|\begin{matrix}(a_p,A_p)\\(b_q,B_q)\end{matrix}\right.\right] = H_{pq}^{mn}\left[x\left|\begin{matrix}(a_p+\sigma A_p,A_p)\\(b_q+\sigma B_q,B_q)\end{matrix}\right.\right]; \tag{B.4}$$

(3) Fox 函数的分数阶导数是一个函数簇的映射

$${}_0D_z^{\nu}\left\{z^{\alpha}H_{p,q}^{m,n}\left[(az)^{\beta}\left|\begin{matrix}(a_p,A_p)\\(b_q,B_q)\end{matrix}\right.\right]\right\} = z^{\alpha-\nu}H_{p+1,q+1}^{m,n+1}\left[(az)^{\beta}\left|\begin{matrix}(-\alpha,\beta),(a_p,A_p)\\(b_q,B_q),(\nu-\alpha,\beta)\end{matrix}\right.\right]. \tag{B.5}$$

$H-$ 函数能被表示成一个可计算的级数和形式

$$H_{pq}^{mn}(z)=\sum_{h=1}^{m}\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{\prod\limits_{j=1,j\neq h}^{m}\Gamma[b_j-B_j(b_h+\nu)/B_h]\ \prod\limits_{j=1}^{n}\Gamma[1-a_j+A_j(b_h+\nu)/B_h]}{\prod\limits_{j=m+1}^{q}\Gamma[1-b_j+B_j(b_h+\nu)/B_h]\ \prod\limits_{j=n+1}^{p}\Gamma[a_j-A_j(b_h+\nu)/B_h]}\times\frac{(-1)^{\nu}z^{(b_h+\nu)/B_h}}{\nu!B_h},\tag{B.6}$$

不过，这个级数具有慢的收敛性. 对于大宗变量 $|z|\to\infty$，Fox 函数能被展成一个留数的级数和

$$H_{p,q}^{m,n}(z)\sim\sum_{\nu=0}^{\infty}\mathrm{res}[\chi(s)z^s],\tag{B.7}$$

其中，点 $s=(a_j-1-\nu)/A_j$，$j=1,2,\cdots,n$.

一些特殊函数和它们的 Fox 函数的表示

$$z^b\mathrm{e}^{-z}=H_{0,1}^{1,0}\left[z\Big|\overline{\ \ }_{(b,1)}\right],\tag{B.8}$$

$$\frac{1}{(1+z)^r}=H_{1,1}^{1,1}\left[z\left|\begin{matrix}(1-r,1)\\(0,1)\end{matrix}\right.\right],\tag{B.9}$$

$$\frac{z^{\beta}}{1+az^{\alpha}}=a^{-\beta/\alpha}H_{1,1}^{1,1}\left[az^{\alpha}\left|\begin{matrix}(\beta/\alpha,1)\\(\beta/\alpha,1)\end{matrix}\right.\right].\tag{B.10}$$

Maitland 广义超几何函数或 Wright 函数:

$${}_p\psi_q\left[\begin{matrix}(a_1,A_1),\cdots,(a_p,A_p)\\(b_1,B_1),\cdots,(b_q,B_q)\end{matrix}\right|-z\right]=H_{p,q+1}^{1,p}\left[z\left|\begin{matrix}(1-a_1,A_1),\cdots,(1-a_p,A_p)\\(0,1),(1-b_1,B_1),\cdots,(1-b_q,B_q)\end{matrix}\right.\right].\tag{B.11}$$

广义 Mittag-Leffler 函数 $[E_{\alpha,1}(z)=E_{\alpha}(z)]$:

$$E_{\alpha,\beta}(-z)=H_{1,2}^{1,1}\left[z\left|\begin{matrix}(0,1)\\(0,1),(1-\beta,\alpha)\end{matrix}\right.\right]=\sum_{j=0}^{\infty}\frac{z^j}{\Gamma(\beta+\alpha j)}.\tag{B.12}$$

附录C　莱维分布的一些注释和基于 Fox 函数的精确表示

在概率论的历史上，正则分布之所以基本和重要，是由于中心极限定理，它是大数定律的必然结果. 这个概念被 Paul Lévy 的工作扩展了. 从那以后，广义正则分布被命名了，一些经典书中论及了广义中心极限定理.

按照莱维的观点，一个分布 F 是稳定的，当且仅当对两个正常数 c_1 和 c_2，则存在一个正常数 c，从而由

$$c_1X_1 + c_2X_2 = cX, \tag{C.1}$$

给出的 X 是一个独立的与随机变量 X_1 和 X_2 同分布的随机变量. 如果

$$\phi(z) = \langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}Xz} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}Xz} \mathrm{d}F(X), \tag{C.2}$$

代表分布 F 的特性函数，那么当且仅当

$$\phi(c_1z)\phi(c_2z) = \phi(cz), \tag{C.3}$$

则 F 是稳定的.

$$Y_n \equiv \sum_i X_i = c_nX + \gamma_n \tag{C.4}$$

$$\phi^n(z) = \phi(c_nz)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n z} \tag{C.5}$$

命题 1　$$\psi(z) = \log\phi(z) = \mathrm{i}\gamma z - c|z|^{\alpha}\left[1 + \mathrm{i}\beta\frac{z}{|z|}\omega(z,\alpha)\right] \tag{C.6}$$

其中，α、β、γ 和 c 是常数 (γ 为任何实数，$0 < \alpha \leqslant 2$，$-1 < \beta < 1$ 和 $c > 0$)，并且

$$\omega(z,\alpha) = \begin{cases} \tan\left(\dfrac{\pi\alpha}{2}\right), & \alpha \neq 1; \\ \dfrac{2}{\pi}\log|z|, & \alpha = 1. \end{cases} \tag{C.7}$$

其中，α 成为莱维指标或特征指数. 从方程 (C.6) 可知在方程 (C.3) 的归一化因子 $c_n = n^{1/\alpha}$. $\alpha = 2$ 的极限情况对应于中心极限定理产生的高斯归一化分布. 对于 $\beta = 2$，分布是对称的. γ 起到平移分布的作用，而 c 是一个 X 的标度因子. 因此 γ 和 c 并不是主要参数，可以不必关注它们. 特性函数满足以下命题.

命题 2 $|\phi(z)| = \mathrm{e}^{-|z|^\alpha}$，$\alpha \neq 1$，那么人们能写

$$\psi(z) = -|z|^\alpha \exp\left\{\mathrm{i}\frac{\pi\beta}{2}\mathrm{sgn}(z)\right\}, \tag{C.8}$$

新的中心常数 β 被局限在下列区域:

$$|\beta| = \begin{cases} \alpha, & 0 < \alpha < 1; \\ 2-\alpha, & 1 < \alpha < 2. \end{cases} \tag{C.9}$$

命题 3 分布密度函数 $f_{\alpha,\beta}(x)$ 是由方程 (C.8) 定义的 $\psi(x)$ 的傅里叶变换，则

$$f_{\alpha,\beta}(x) = \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\int_0^\infty \mathrm{d}z \exp\left[-\mathrm{i}xz - z^\alpha \exp\left(\mathrm{i}\frac{\pi\beta}{2}\right)\right]. \tag{C.10}$$

从而

$$f_{\alpha,\beta}(x) = f_{\alpha,-\beta}(-x) \tag{C.11}$$

和

$$f_{\alpha,0}(x) = f_{\alpha,0}(-x) \tag{C.12}$$

关于 x 对称.

命题 4 (Lévy-Gnedenko 广义中心极限定理) 对于独立同分布随机变量 X_1, $X_2, \cdots, X_n$，令 $Y_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$. 如果 Y_n 的分布，具有合适的归一化，在极限 $n \to \infty$ 下，收敛于某个分布 F，F 是稳定的. 若它的矩有限，那么 F 是高斯函数，并且满足中心极限定理.

命题 5 莱维稳定分布的渐进行为服从逆幂律:

$$f_{\alpha,\beta}(x) \sim \frac{A_{\alpha,\beta}}{|x|^{1+\alpha}}, \quad \alpha < 2. \tag{C.13}$$

命题 6 对于所有 $0 < \mu < 2$ 的莱维稳定律，方差发散:

$$\langle x^2 \rangle \to \infty. \tag{C.14}$$

命题 7 相反地，对于任何 $0 \leqslant \delta < \mu < 2$，$x$ 的绝对值的分数阶矩

$$\langle |x|^\delta \rangle < \infty \tag{C.15}$$

存在.

命题 8 一个稳定律的解析形式可以通过 Fox 函数给出. 对于 $\alpha > 1$，缩写 $\varepsilon = 1/\alpha$ 和 $\gamma = (\alpha - \beta)/(2\alpha)$，

$$f_{\alpha,\beta}(x) = \varepsilon H_{2,2}^{1,1}\left[x \left| {}^{(1-\varepsilon,\varepsilon),(1-\gamma,\gamma)}_{(0,1),(1-\gamma,\gamma)} \right.\right]; \tag{C.16}$$

对于 $\alpha < 1$，结果为

$$f_{\alpha,\beta}(x^{-1}) = \varepsilon x^2 H_{2,2}^{1,1}\left[x\left|{}^{(-1,1),(-\gamma,\gamma)}_{(-\varepsilon,\varepsilon),(-\gamma,\gamma)}\right.\right]. \tag{C.17}$$

从已知的 Fox 函数理论，级数表示和渐进行为能被确定. 对于 $\alpha > 1$，有

$$f_{\alpha,\beta}(x) = \frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\Gamma(1+n\varepsilon)}{n!}\sin(\pi n\gamma)(-x)^{n-1} \tag{C.18}$$

和渐进行为

$$f_{\alpha,\beta}(x) \sim \frac{1}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\Gamma(1+n\alpha)}{n!}\sin(\pi n\alpha\gamma)|x|^{-1-n\alpha}, \quad |\beta| > \alpha - 2. \tag{C.19}$$

相反，对于 $\alpha < 1$，大和小 x 公式分别由方程 (C.18) 和 (C.19) 给出，但排除 $|\beta| = \alpha$ 的情况[①].

命题 9　对于 $\alpha = 2$，$\beta \equiv 0$，稳定密度与高斯正则分布等同.

命题 10　对于 $\alpha = 1$ 和 $\beta = 0$，稳定分布与柯西和洛伦兹分布等同：

$$f_{1,0}(x) = \frac{a}{\pi(a^2+x^2)}. \tag{C.20}$$

命题 11　如果 $0 < \alpha < 1$ 和 $\beta = -\alpha$，对于所有 $x < 0$，分布密度函数 $f_{\alpha,-\alpha}(x) = 0$ 为单边. 例如，$\alpha = 1/2$ 和 $\beta = -1/2$ 的单边稳定密度函数为

$$f_{1/2,-1/2}(x) = \frac{1}{2\sqrt{2}}x^{-3/2}\mathrm{e}^{x/4}. \tag{C.21}$$

命题 12　对于不太小和不太大的 x，以及 $\alpha \approx 0$，分布密度函数 $f_{\alpha,-\alpha}(x)$ 能近似成一个对数正则分布：

$$f_{\alpha,-\alpha}(x) \propto \frac{1}{x}\exp\left[-\frac{\alpha^2}{2}(\log x)^2\right]. \tag{C.22}$$

对于 $\alpha = \dfrac{3}{2}$ 和 $\beta = 0$，回到 Holtsmark 分布. 上述提及的特殊情况能被包括在一个相图.

---

① 这个事实，以及方程 (C.16) 和 (C.17) 之间明显的相似性，均是基于基本性质:

$$H_{p,q}^{m,n}\left[x\left|{}^{(a_p,A_p)}_{(b_q,B_q)}\right.\right] = H_{q,p}^{n,m}\left[\frac{1}{x}\left|{}^{(1-b_q,B_q)}_{(1-a_p,A_p)}\right.\right].$$

附录D　α 稳定随机变量的注记

关于 α 稳定过程的著作见参考文献 (Janicki et al., 1994) 和 (Samorodnidky et al., 1994). 一般读者可能不熟悉 α 稳定分布和过程，下面给出一点注记.

当 $\{X_i, i=1,\cdots,n\}$ 是一系列独立同分布随机变量，变量 $Y = c(n)\sum_{j=1}^{n} X_j$ 的分布能从特性函数来确定，

$$\begin{aligned}\langle\exp[\mathrm{i}kY]\rangle &= \left\langle \exp\left[\mathrm{i}kc(n)\sum_{j=1}^{n} X_j\right]\right\rangle \\ &= \left\langle \prod_{j=1}^{n}\exp[\mathrm{i}kc(n)X_j]\right\rangle = \langle\exp[\mathrm{i}kc(n)X]\rangle^n. \end{aligned} \tag{D.1}$$

如果在方程 (D.1) 中，Y 的分布与 X 的分布相同，则特性函数 $f(k) = \langle\exp[\mathrm{i}kY]\rangle$ 为

$$f(k) = f[c(n)k]^n, \tag{D.2}$$

其解是

$$f(k) = \exp[-\sigma^\alpha|k|^\alpha/\alpha], \tag{D.3}$$

$$c(n) = n^{-1/\alpha}. \tag{D.4}$$

之所以选择常数 σ^α/α，是因为在高斯情况 $\alpha = 2$，它与通常的结果相一致. 仅当 $\alpha > 0$，方程 (D.3) 表示一个特性函数. 特性函数 (D.4) 对应的分布具有幂函数尾巴，$P(X > x) \sim x^{-\alpha}$. 当 $\alpha > 2$，分布的二次矩存在，并且独立同分布随机变量的和在中心极限定理支配下，趋于高斯分布. 对于 $0 < \alpha < 2$，分布确实有一个吸引区，以至于独立同分布随机变量的和具有尾巴分布，即 $P(X > x) \sim x^{-\gamma}$，在更一般条件下，趋于一个 α 稳定分布 $(\alpha = \gamma)$. 这就是关于 α 稳定分布的中心极限定理的推广. 这个结论的证明与正则分布的中心极限定理的证明是类似的.

事实上，莱维飞行可以由一个 α 稳定噪声驱动的力自由朗之万方程产生.

参 考 文 献

第 1 章

包景东. 2011. 热力学与统计物理简明教程 [M]. 北京：高等教育出版社.

陈式刚. 2010. 非平衡统计力学 [M]. 北京：科学出版社

黄祖洽，丁鄂江. 2008. 输运理论 (第二版) [M]. 北京：科学出版社

栗弗席兹 E M，皮塔耶夫斯基 ΠΠ. 2008. 物理动理学 (第二版)[M]. 徐锡申，徐春华，黄京民，译. 北京：高等教育出版社

Balescu R. 1997. Statistical dynamics, Matter out of Equilibrium [M]. London: Imperial College Press

Breuer H P, Petruccione F. 2006. The Theory of Open Quantum System [M]. Oxford: Clarendon Press

Kampen N G Van. 1997. Stochastic Processes in Physics and Chemistry [M]. Netherlands: Elsevier Science B. V.

Risken H. 1989. The Fokker-Planck Equation [M]. New York: Spinger

第 2 章

Breuer H P, Petruccione F. 2006. The Theory of Open Quantum System [M]. Oxford: Clarendon Press

Kampen N G Van. 1997. Stochastic Processes in Physics and Chemistry [M]. 2nd ed. Netherlands: Elsevier Science B. V.

第 3 章

包景东. 2005. 分数阶布朗运动和反常扩散 [J]. 物理学进展, 25: 359

Alexander S, Bernasconl J, Schneider W R, et al. 1981. Excitation dynamics in random one-dimensional system [J]. Rev Mod Phys, 53: 175

Bao J D, Zhou Y. 2006. Anomalous diffusion in periodic potential under self-similar colored noise. Phys Rev E, 74: 041125

Bao J D, Zhuo Y Z, Hänggi P. 2006. Intermediate dynamics between Newton and Langevin. Phys Rev E, 74: 061111

Bouchaud J P, Georges A. 1990. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications [J]. Phys Rep, 195: 127

Klafter J, Shlesinger M F, Zumofen G. 1996. Beyond Brownian motion. Physics Today, February: 33

Machta J. 1985. Random-walks on site disordered lattices [J]. J Phys A, 18: L531

Metzler R, Klafter J. 2000. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach [J]. Phys Rep, 339:1

Noskowicz S H, Goldhirsch I. 1988. Average versus typical mean 1st-passag time in a random-walk [J]. Phys Rev Lett, 61: 500

Sokolov I M, Klafter J, Blumen A. 2002. Fractional kinetics. Physics Today, November: 48

Stanley H E, Afanasyev V, Amaral L A N, et al. 1996. Anomalous fluctuations in the dynamics of complex systems: from DNA and physiology to econophysics. Physica A, 224: 302

第 4 章

卢宏, 覃莉, 包景东. 2009. 周期场中布朗运动的非各态历经性 [J]. 物理学报, 58：8127

Bai Z W, Bao J D. 2005. Classical and quantum diffusion in the presence of velocity-dependent coupling [J]. Phys Rev E, 72: 061105

Bao J D, Hänggi P, Zhuo Y Z. 2005. Non-Markovian Brownian dynamics and non-ergodicity [J]. Phys Rev E, 72: 061107

Bao J D, Liu S J. 1999. Broadband colored noise: digital simulation and dynamical effects [J]. Phys Rev E, 60: 7572

Bao J D, Song Y L, Ji Q, et al. 2005. Harmonic velocity noise: Non-Markovian features of noise-driven system at long times [J]. Phys Rev E, 72: 011113

Bao J D, Zhuo Y Z. 2003. Ballistic diffusion induced by a thermal broadband noise [J]. Phys Rev Lett, 91: 138104

Bao J D, Zhuo Y Z. 2005. Anomalous dissipation: Strong non-Markovian effect and its dynamical origin [J]. Phys Rev E, 71: R010102

Bel G, Barkai E. 2005. Weak ergodicity breaking in the continue-time random walk. Phys Rev Lett, 94: 240602

Deng W H, Barkai E. 2009. Ergodic properties of frictional Brownian-Langevin equation. Phys Rev E, 79: 011112

Dykman M I, Mannella R, McClintock P V E, et al. 1993. Probability distributions and escape rates for systems driven by quasimonochromatic noise. Phys Rev E, 47: 3996

Dykman M I, McClintock P V E, Stein N D, et al. 1991. Quasimonochromatic noise: New features of fluctuations in noise-driven nonlinear systems [J]. Phys Rev Lett, 67: 933

Florencio Jr J, Lee M H. 1985. Exact time evolution of a classical harmonic-oscillator chain [J]. Phys Rev A, 31: 3231

Kampen N G Van. 1971. Note on ergodic functions. Physica, 53: 98

Kim J, I Sawada I. 2000. Dynamics of a harmonic oscillator on the Bethe lattics [J]. Phys Rev E, 61: R2172

Lapas L C, Morgado R, Vainstein M H, et al. 2008. Khinchin theorem and anomalous diffusion. Phys Rev Lett, 101: 230602

Lee M H. 2001. Ergodic theory, infinite products and long time behavior in Hermitian models [J]. Phys Rev Lett, 87: 250601

Lee M H. 2007. Birkhoff's theorem, many-body response function, and the ergodic condition [J]. Phys Rev Lett, 98: 110403

Lee M H. 2007. Why irreversibility is not a sufficient condition for ergodicity [J]. Phys Rev Lett, 98: 190601

Lutz E. 2004. Power-law tail distribution and nonergodicity. Phys Rev Lett, 93: 190602

Montina A, Arecchi F T. 2008. Quantum decoherence reduction by increasing the thermal bath temperature [J]. Phys Rev Lett, 100: 120401

Morgado R, Oliveira F A, Batrouni G G, et al. 2002. Relation between anomalous and normal diffusion in systems with memory [J]. Phys Rev Lett, 89: 100601

Rebenshtok A, Barkai E. 2008. Weakly non-ergodic statistical physics. J Stat Phys, 133: 565

第 5 章

Abou B, Gallet F. 2004. Probing a nonequilibrium Einstein relation in an aging colloidal glass. Phys Rev Lett, 93: 160603

Bao J D. 2003. Transport in a flashing ratchet in the presence of anomalous diffusion. Phys Lett A, 314: 203

Bao J D. 2006. Time-dependent barrier passage of a non-Ohmic damping system [J]. J Chem Phys, 124: 114103

Bao J D, Zhuo Y Z. 2003. Investigation on anomalous diffusion for nuclear fusion reactions [J]. Phys Rev C, 67: 064606

Goychuk I, Hänggi, arXv: cond-mat/stat-mech 0705.37118v1, 2007

Hänggi P, Marchesoni F. 2009. Artificial Brownian motors: Controlling transport on the nanoscale [J]. Rev Mod Phys, 81: 387

Lü K, Bao J D. 2007. State transition of a non-Ohmic damping system in a corrugated plane [J]. Phys Rev E, 76: 061119

Magnasco M O, Stolovityky G. 1988. Feynman's ratchet and paw [J]. J Stat Phys, 93: 615

Mauger A. 2005. Brownian motion in an aging medium [J]. Phys Rev E, 71: 011109

Mauger A, Pottier N. 2002. Aging effects in the quantum dynamics of a dissipative free particle: Non-Ohmic case [J]. Phys Rev E, 65: 056107

Porrà J M, Wang K G, Masoliver J. 1996. Generalized Langevin equations: Anomalous diffusion and probability distributions [J]. Phys Rev E, 53: 5872

Pottier N. 2003. Aging properties of an anomalously diffusing particle [J]. Physica A, 317: 371

Pottier N, Mauger A. 2004. Anomalously diffusion of a particle in an aging medium [J]. Physica A, 332: 15

Reimann P. 2002. Brownian motors: moisy transport far from equilibrium [J]. Phys Rep, 361: 57

Weiss U. 2008. Quantum Dissipative System [M]. 3rd ed. Singapore: World Scientific

Zhang X P, Bao J D. 2006. Anomalous heat conduction induced by finite and non-Markovian dynamics [J]. Phys Rev E, 73: 061103

第 6 章

Balescu R. 1997. Statistical dynamics: Matter Out of Equilibrium [M]. London: Imperial College Press.

Barkai E. 2001. CTRW pathways to the fractional diffusion equation [J]. Chem Phys, 284: 13

Chechkin A V, Hofmann M, Sokolov M. 2009. Continue-time random walk with correlated waiting times [J]. Phys Rev E, 80: 031112

Fogedby H C. 1994. Langevin equations for continuous time Lévy flights [J]. Phys Rev E, 50: 1657

Lin F, Bao J D. 2011. Environment-dependent continue time random walk model [J]. Chin Phys B, 20: 040502

Metzler R, Klafter J. 2000. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach [J]. Phys Rep, 339: 1

Metzler R, Klafter J, Sokolov I M. 1998. Anomalous transport in external fields: Continuous time random walks and fractional diffusion equations extended [J]. Phys Rev E, 58: 1621

Shlesinge M F, Klafter J, Wong Y M. 1982. Random-walks with infinite spatial and temporal moments [J]. J Stat Phys, 27: 499

第 7 章

周激流，蒲亦非，廖科. 2010. 分数阶微积分原理及其在现代信号分析与处理中的应用 [M]. 北京：科学出版社

Achar B N Narahari, Hanneken J W, Enck T, et al. 2001. Dynamics of the fractional oscillator [J]. Physica A, 297: 361

Baleanu D, Golmankhaneh A K, Nigmatullin R, et al. 2010. Fractional Newtonian mechanics [J]. Cent Eur J Phys, 8: 120

Kolwankar K M, Gangal A D. Fractional differentiability of nowhere differentiable functions and dimensions [J]. Chaos, 1996, 6: 505

Podlubny I. 1999. Fractional Differential Equations [M]. Academic Press

Sokolov I M, Klafter J, Blumen A. 2002. Fractional kinetics [J]. Physics Today, November: 48

第 8 章

Burov S, Barkai E. 2008a. Critical exponent of the fractional Langevin equation [J]. Phys Rev Lett, 100: 070601

Burov S, Barkai E. 2008b. Fractional Langevin equation: Overdamped, underdamped, and critical behaviors [J]. Phys Rev E, 78: 031112

Deng W H, Barkai E. 2009. Ergodic properties of fractional Brownian-Langevin motion [J]. Phys Rev E, 79: 011112

Laskin N. 2000. Fractional market dynamics [J]. Physica A, 287: 482

Lizana L, Ambjörnsson T, Yaloni A, et al. 2010. Foundation of fractional Langevin equation: Harmonization of a many-body problem [J]. Phys Rev E, 81: 051118

Lutz E. 2010. Fractional Langevin equation [J]. Phys Rev E, 64: 051106

Miller J M, Ross B. 1993. An Introduction to the Fractional Differential Equations [M]. New York: Wiley

Nikolai L. 1999. Stochastic theory of foreign exchange market dynamics [J]//arXiv: cond-mat/9909427

Picozzi S, West J B. 2002. Fractional Langevin model of memory in financial markets [J]. Phys Rev E, 66: 046118

Taloni A, Chechkin A, Klafter J. 2010. Generalized elastic model yields a fractional Langevin equation description [J]. Phys Rev Lett, 104: 160602

West J B, Picozzi S. 2002. Fractional Langevin model of memory in financial time series [J]. Phys Rev E, 65: 037106

第 9 章

Barkai E. 2001. Fractional Fokker-Planck equation, solution, and application [J]. Phys Rev E, 63: 046118

Barkai E, Silbey R J. 2000. Fractional Kramers equation [J]. J Phys Chem B, 104: 3866

Kotulski M. 1995. Asymptotic distributions of continue-time random-walks: A probabilistic approach [J]. J Stat Phys, 81: 777

Metzler R. 2000. Generalized Chapmann-Kolmogorov equation: A unifying approach to the description of anomalous transport in external fields [J]. Phys Rev E, 62: 6233

Metzler R, Barkai E, Klafter J. 1999. Anomalous diffusion and relaxation close to thermal equilibrium: A fractional Fokker-Planck equation approach [J]. Phys Rev Lett, 82: 3563

Metzler R, Sokolov I M. 2002. Superdiffusive Klein-Kramers equation: Normal and anomalous time evolution and Lévy walk moments [J]. Europhys Lett, 58: 482

Yanovsky V V, Chechkin A V, Schertzer D, et al. 2000. Lévy anomalous diffusion and fractional Fokker-Planck equation [J]. Physica A, 282: 13

第 10 章

上官丹骅, 吕艳, 包景东. 2010. 陡峭势中莱维飞行的非吉布斯–玻尔兹曼分布 [J]. 物理学报 59：7607

Bao J D, Wang H Y, Jia Y, et al. 2005. Cancellation phenomenon of barrier escape driven by a non-Gaussian noise [J]. Phys Rev E, 72: 051105

Barkai E, Fleurov V N. 1998. Generalized Einstein relation: A stochastic modeling approach [J]. Phys Rev E, 58: 1296

Chechkin A V, Gonchar V Yu. 2000. A model for present Lévy motion [J]. Physica A, 277: 312

Chechkin A V, Gonchar V Yu, Klafter J, et al. 2002. Stationary states of non-linear oscillators driven by Lévy noise [J]. Chem. Phys. 284: 233

Chechkin A V, Gonchar V Yu, Klafter J, et al. 2004. Lévy flights in a steep potential well [J]. J Stat Phys, 115: 1505

Chechkin A V, Klafter J, Gonchar V Yu, et al. 2003. Bifurcation, bimodality, and finite variance in confined Lévy flights [J]. Phys Rev E, 67: 010102(R)

Ditlevsen P D. 1999. Anomalous jumping double-well potential [J]. Phys Rev E, 60: 172

Dybiec B. 2009. Lévy noises: stochastic resonance in a single-well potential [J]. Phys Rev E, 80: 041111

Dybiec B, Gudowska-Nowak E. 2008. Transport in a Lévy ratchet: Group velocity and distribution spread [J]. Phys Rev E, 78: 011117

Fogedby H C. 1994. Lévy flights in random environments [J]. Phys Rev Lett, 73: 2517

Jespersen S, Metzler R, Fogedby H C. 1999. Lévy flights in external force fields: Langevin and fractional Fokker-Planck equations and their solutions [J]. Phys Rev E, 59: 2736

Lutz E. 2001. Fractional transport equation for Lévy stable processes [J]. Phys Rev Lett, 86: 2208

Lü Y, Bao J D. 2011. Inertial Lévy flight [J]. Phys Rev E, 84: 051108

Rangarajan G, Ding M Z. 2000. Anomalous diffusion and the first passage time problem [J]. Phys Rev E, 62: 120

Shushin A I. 2001. Anomalous two-state model for anomalous diffusion [J]. Phys Rev E, 64: 051108

第 11 章

Compte A, Jou D. 1996. Non-equilibrium thermodynamics and anomalous diffusion [J]. J Phys A, 29: 4321

Tsallis C. 1988. Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics [J]. J Stat Phys, 52: 479

Tsallis C, Bukman D J. 1996. Anomalous diffusion in the presence of external forces: Exact time-dependent solutions and their thermostatistical basis [J]. Phys Rev E, 54: R2197

Tsallis C, Mendes R S, Plastino A R. 1998. The role of constrains within generalized nonextensive statistics [J]. Physica A, 261: 534.

Tsallis C, Tirnakli. 2010. Nonadditive entropy and nonextensive statistical mechanics-Some central concepts and recent applications [J]. J Phys: Conf Ser, 201: 012001

Zanette D H, Alemany P A. 1995. Thermodynamics of anomalous diffusion [J]. Phys Rev Lett, 75: 366

Zhao J L, Bao J D, Gong W P. 2006. Kramers escape rate in nonlinear diffusive media [J]. J Chem Phys, 124: 024112

第 12 章

包景东. 2009. 经典和量子耗散系统的随机模拟方法 [M]. 北京: 科学出版社

林方，包景东. 2008. 基于连续时间行走模型研究反常扩散 [J]. 物理学报, 57: 696

林方，包景东. 2008. 运用 CTRW-Metropolis 模型数值研究亚稳势中粒子逃逸问题 [J]. 计算物理, 30: 696

周妍，包景东. 2007. 空间噪声和朗之万方程的 Monte Carlo 模拟 [J]. 清华大学学报 (自然科学版), 47(S1): 1027

Bao J D. 2004. Numerical integration of a non-Markovian Langevin equation with a thermal band-passing noise [J]. J Stat Phys, 114: 503

Bao J D, Zhou Y. 2005. Comment on “diffusion on a solid surface: anomalous is normal” [J]. Phys Rev Lett, 94: 188901

Fulger D, Scalas E, Gemano G. 2008. Monte Carlo simulation of uncoupled continue-time random walks yielding a stochastic solution of the space-time fractional diffusion equation [J]. Phys Rev E, 77: 021122

Garcia Ojalvo J, Sancho J M. 1989. Noise in Spatially Extended System [M]. New York, Springer

Garcia Ojalvo J, Sancho J M, Ramirez Piscina L. 1992. Generation of spatiotemporal colored noise [J]. Phys Rev A, 46: 4670

Honeycutt R L. 1992. Stochastic Runge-Kutta algorithms. I. White noise [J]. Phys Rev A, 45: 600; II. Colored noise [J], Phys Rev A, 45: 604

Lü K, Bao J D. 2005. Numerical simulation of generalized Langevin equation with arbitrary correlated noise [J]. Phys Rev E, 72: 067701

Lü Y, Bao J D. 2011. Inertial Lévy flight [J]. Phys Rev E, 84: 051108

Make H A, Havlin S, Schwartz M, et al. 1996. Method for generating long-range correlations for large systems [J]. Phys Rev E, 53: 5445

Sancho J M, Lacasta A M, Lindenberg K, et al. 2004. Diffusion on a solid surface: anomalous is normal [J]. Phys Rev Lett, 92: 250601

Zhuo Y, Bao J D. 2006. Time-dependent diffusion in a random correlated potential [J]. Phys Rev E, 73: 031103

附录

Ditlevsen P D. 1999. Anomalous jumping in a double-well potential [J]. Phys Rev E, 60: 172

Janicki A, Weron A. 1994. Simulations and Chaotic Behavior of α-stable Stochastic Precesses [M]. New York: Dekker

Samorodnidky G, Taqqu M S. 1994. Stable Non-Gaussian Random Processes [M]. New York: Chapman & Hall

索　　引

E

F

G

H

J

K

L

T

W

X

Y

Z

《现代物理基础丛书》已出版书目

(按出版时间排序)

1. 现代声学理论基础	马大猷 著	2004.03
2. 物理学家用微分几何 (第二版)	侯伯元, 侯伯宇 著	2004.08
3. 数学物理方程及其近似方法	程建春 编著	2004.08
4. 计算物理学	马文淦 编著	2005.05
5. 相互作用的规范理论 (第二版)	戴元本 著	2005.07
6. 理论力学	张建树, 等 编著	2005.08
7. 微分几何入门与广义相对论 (上册 · 第二版)	梁灿彬, 周彬 著	2006.01
8. 物理学中的群论 (第二版)	马中骐 著	2006.02
9. 辐射和光场的量子统计	曹昌祺 著	2006.03
10. 实验物理中的概率和统计 (第二版)	朱永生 著	2006.04
11. 声学理论与工程应用	朱海潮, 等 编著	2006.05
12. 高等原子分子物理学 (第二版)	徐克尊 著	2006.08
13. 大气声学 (第二版)	杨训仁, 陈宇 著	2007.06
14. 输运理论 (第二版)	黄祖洽 著	2008.01
15. 量子统计力学 (第二版)	张先蔚 编著	2008.02
16. 凝聚态物理的格林函数理论	王怀玉 著	2008.05
17. 激光光散射谱学	张明生 著	2008.05
18. 量子非阿贝尔规范场论	曹昌祺 著	2008.07
19. 狭义相对论 (第二版)	刘 辽, 等 编著	2008.07
20. 经典黑洞与量子黑洞	王永久 著	2008.08
21. 路径积分与量子物理导引	侯伯元, 等 著	2008.09
22. 量子光学导论	谭维翰 著	2009.01
23. 全息干涉计量——原理和方法	熊秉衡, 李俊昌 编著	2009.01
24. 实验数据多元统计分析	朱永生 编著	2009.02
25. 微分几何入门与广义相对论(中册 · 第二版)	梁灿彬, 周彬 著	2009.03
26. 中子引发轻核反应的统计理论	张竞上 著	2009.03
27. 工程电磁理论	张善杰 著	2009.08
28. 微分几何入门与广义相对论(下册 · 第二版)	梁灿彬, 周彬 著	2009.08
29. 经典电动力学	曹昌祺 著	2009.08
30. 经典宇宙和量子宇宙	王永久 著	2010.04

31. 高等结构动力学(第二版)	李东旭 编著	2010.09
32. 粉末衍射法测定晶体结构(第二版 · 上、下册)	梁敬魁 编著	2011.03
33. 量子计算与量子信息原理	Giuliano Benenti 等著	
——第一卷：基本概念	王文阁, 李保文 译	2011.03
34. 近代晶体学(第二版)	张克从 著	2011.05
35. 引力理论(上、下册)	王永久 著	2011.06
36. 低温等离子体	B. M. 弗尔曼, И. M. 扎什京 编著	
——等离子体的产生、工艺、问题及前景	邱励俭 译	2011.06
37. 量子物理新进展	梁九卿，韦联福 著	2011.08
38. 电磁波理论	葛德彪，魏 兵 著	2011.08
39. 激光光谱学	W. 戴姆特瑞德 著	
——第 1 卷：基础理论	姬 扬 译	2012.02
40. 激光光谱学	W. 戴姆特瑞德 著	
——第 2 卷：实验技术	姬 扬 译	2012.03
41. 量子光学导论(第二版)	谭维翰 著	2012.04
42. 中子衍射技术及其应用	姜传海, 杨传铮 编著	2012.05
43. 凝聚态、电磁学和引力中的多值场论	H. 克莱纳特 著	
	姜 颖 译	2012.06
44. 反常统计动力学导论	**包景东 著**	**2012.06**